



# **TUTORIAL TOTALCHROM**

**Versión 6.2**

**Depto. de Atención a Clientes  
Perkin Elmer de México**

# CONTENIDO

---

## Tutorial Parte I

|   |                                                 |    |
|---|-------------------------------------------------|----|
| □ | El Navegador del Totalchrom.....                | 3  |
| □ | Coleccionando su Primer Archivo de Datos.....   | 5  |
| ➤ | Construyendo un Método Rápido.....              | 9  |
| ➤ | Construyendo una Lista de Viales.....           | 14 |
| ➤ | Injectando su Estándar y Adquiriendo datos..... | 17 |
| ➤ | Revisando la Grafica.....                       | 18 |
| ▪ | Amplificando la Grafica.....                    | 19 |
| ▪ | Re escalando la Grafica.....                    | 20 |
| ▪ | El reporte de default y la Grafica.....         | 21 |

## Tutorial Parte 2

|   |                                                                   |    |
|---|-------------------------------------------------------------------|----|
| □ | Optimizando un método utilizando el Editor Grafico de Método..... | 22 |
| ➤ | Abriendo el Editor Grafico del Método.....                        | 23 |
| ➤ | Cambiando el display de la Grafica.....                           | 26 |
| ➤ | Afinación Fina de la Detección de Picos.....                      | 29 |
| ➤ | Creando una Lista de Componentes .....                            | 34 |
| □ | Utilizando el Editor del Método.....                              | 38 |
|   | Fijando los parámetros de calibración.....                        | 38 |
|   | Llevando a cabo una calibración manual.....                       | 42 |
|   | Guardando un método.....                                          | 47 |
| □ | Construyendo un Formato de reporte.....                           | 48 |
| □ | Construyendo una Secuencia.....                                   | 51 |
|   | Utilizando la Plantilla de la Secuencia.....                      | 51 |
|   | Utilizando la Hoja de calculo de la Secuencia.....                | 54 |
| □ | Reprocesamiento en Lote de Archivos de una Secuencia.....         | 59 |
| □ | Revisar los Resultados utilizando el Reproceso de Resultados..... | 61 |

# TUTORIAL (PARTE 1)

---

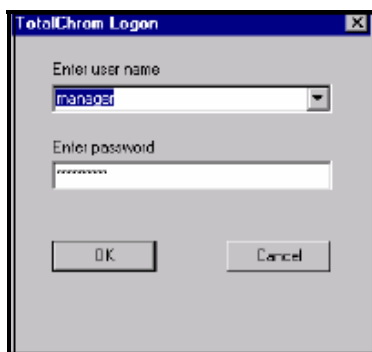
## Navegador TotalChrom

Ud. puede acceder a las diferentes funciones del Totalchrom desde la ventana del Navegador . La forma más conveniente de iniciar en el Navegador es desde la ventana de TCWS Links (ó TCCS\_Links para TotalChrom Cliente/Servidor), el cual es creado durante la instalación

- **Para abrir la ventana de Navegador:**
  1. Dar un “click” en el botón de inicio y seleccione **Programas**
    - Seleccionar **TotalChrom Workstation Ver6.2**
    - Dar doble “click” en el icono de **TCNav** ,



Aparecerá la ventana identificada como **Totalchrom logon**:



---

**Nota:** Usted deberá registrarse con una cuenta de usuario, la cual ha sido previamente autorizada por el gerente. Si usted tiene alguna pregunta, consulte a su gerente de sistemas.

---

## Tutorial Parte I

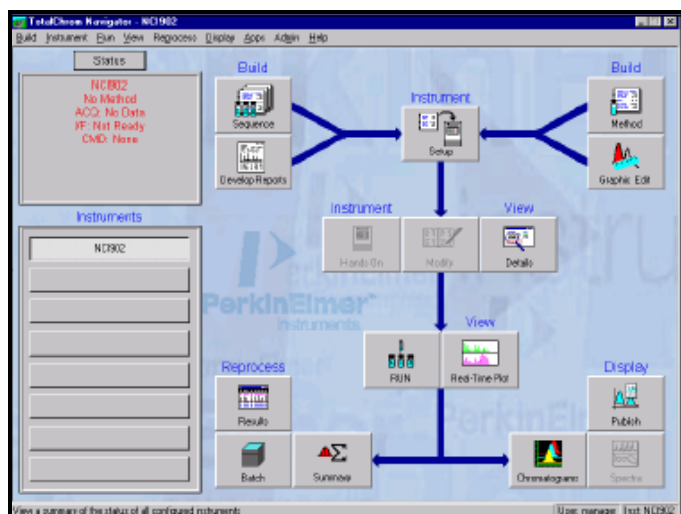
2. Escriba su nombre de usuario y su contraseña. Después seleccione **OK**.  
Aparecerá la ventana de **Totalchrom Navegador**

Barra de título

Barra de menú

Panel de selección del instrumento

Barra de status



La ventana de Navegador es una representación gráfica de las funciones principales del TotalChrom. El Navegador tiene cuatro áreas principales:

- La barra del Título y del Menú en la parte superior
- El Tablero de Selección de instrumentos a la izquierda.
- Los iconos de las funciones en la parte central de la pantalla.
- La Barra del estado del instrumento en el fondo de la ventana.

Nosotros utilizaremos el tablero de selección de instrumento y algunos iconos de las funciones en este tutorial.

## Tutorial Parte I

---

### Obteniendo su Primer Archivo de Datos

En esta parte del tutorial :

- Utilizara el “Quik Star” ó Inicio rápido
- Construirá un Método Rápido designando los parámetros del Instrumento
- Construirá una Lista de Viales
- Se adquirirán datos
- Ajustará el tiempo real de la grafica conforme los datos sean adquiridos
- Revisará las salidas de Impresión

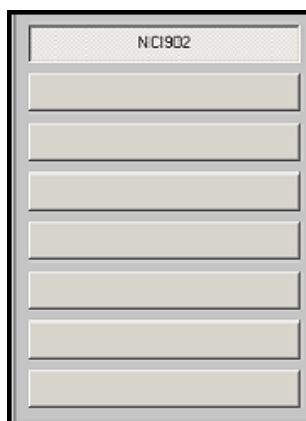
### Utilizando el Inicio Rápido ó “Quick Star” para Adquirir los Datos

La opción de Inicio Rápido ó “Quick Star” permite coleccionar datos sin tener que editar un método laborioso. Con el “Quick Star” , usted fijará sólo los parámetros esenciales para llevar a cabo una corrida.

El “Quick Star” es muy útil cuando usted está empezando a utilizar el TotalChrom, si esta realizando una corrida de prueba , analizando una muestra que no haya sido analizado antes ó cuando se están optimizando las condiciones cromatográficas de un determinado método.

➤ **Para empezar a fijar los parámetros y adquirir datos:**

1. De la ventana de selección del Instrumento del Navegador, seleccione el instrumento que usted quiere utilizar para la colección de datos, (usted utilizará este instrumento a lo largo del tutorial)

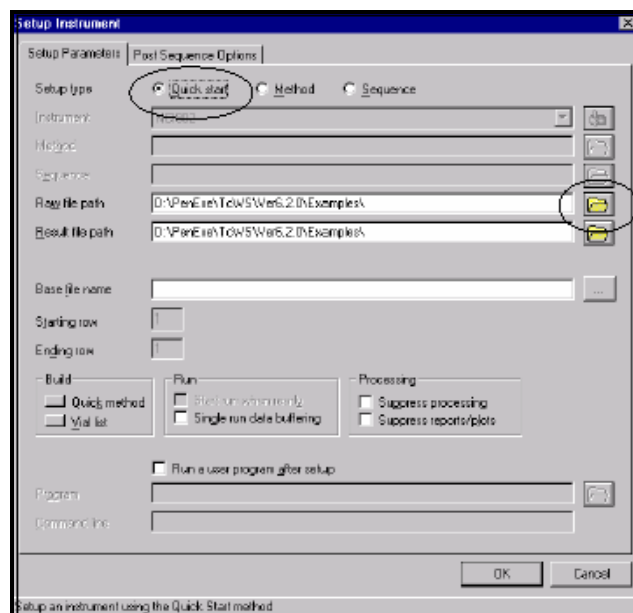


2. Dar un “click” en el icono del “Setup” del Navegador.



Aparecerá la ventana de diálogo identificada como “Setup Instrument”

3. En la ventana de diálogo de “Setup Instrument”, seleccione “Quick Star” en la opción de Setup type

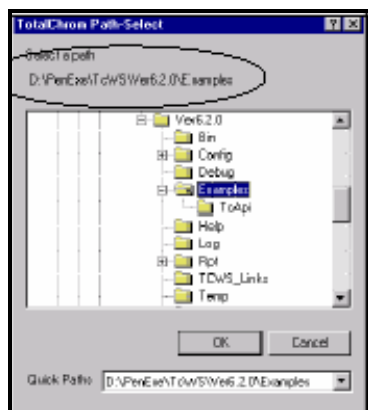


3. Dar un “click” en el folder de la Línea de Raw File Path (tal como se muestra arriba)

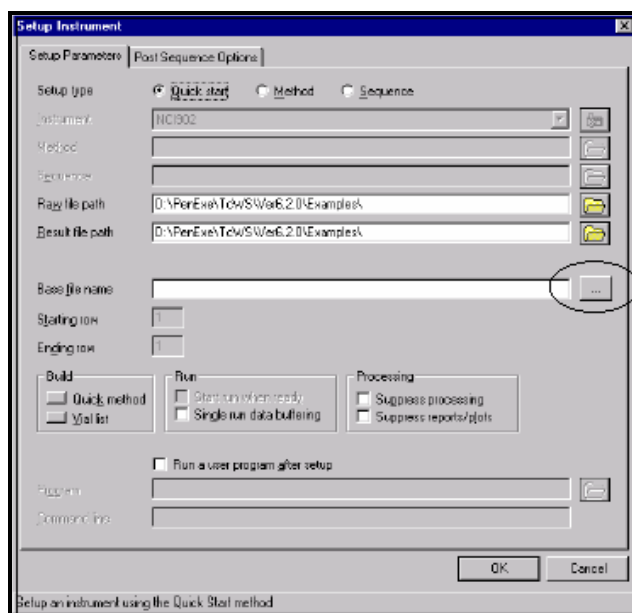
## Tutorial Parte I

---

Aparecerá la ventana identificada como **“Totalchrom Path-Select”**:



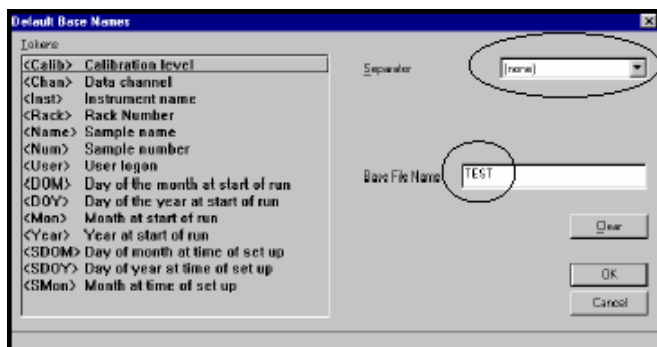
5. En la ventana de diálogo de selección de la ruta del TotalChrom , seleccione la ruta completa **“C:\penexe \... \ examples”** . Dar **OK**.
6. Realice el mismo procedimiento para la Línea del **“Result File Path”**
7. Para fijar un Nombre del “Archivo Base” , de un **“click”** en el botón de la derecha



Aparecerá la ventana identificada como **“Default Base Name”**

---

8. En la ventana de **“Default Base Name”**, seleccionar **None** en el cuadro del Separador y escriba **TEST** en el cuadro del Nombre de archivo Base.



*Este diálogo es acerca de archivos simbólicos (una nueva característica de la versión 6.2). Por favor consulte la Guía de Usuario para una descripción más detallada sobre esta opción.*

Todos los archivos relacionados con este método rápido que estamos creando - el crudo, el de resultados, el método, y la secuencia de archivos- utilizarán este nombre de archivo base.

El TotalChrom añadirá tres dígitos a una corrida ó un número de ciclo a este nombre (basado en el número de dígitos especificado en la ventana del Nombre del Archivo Base ) cuando este crea los nombres del archivo crudo y de resultados

9. Dar un **“click”** al botón de **OK** para cerrar la ventana de dialogo de Nombre de archivo base

10. Deje las opciones de " Suprimir el proceso" y" Suprimir reports/plots" sin checar , tal como se muestra en la ventana de **“ SetupInstrument”**

Nosotros queremos procesar el archivo de datos inmediatamente después de la corrida, y también imprimir un reporte y la grafica al final de la corrida

11. Todavía no de un **“click”** al botón de **OK**

**Usted ha fijado las entradas en el cuadro de diálogo del “Setup” El siguiente paso es construir un método rápido.**

*Para información adicional sobre el cuadro de diálogo del Setup, ver " Adquirir y Ver datos" en Capítulo 12 de la Guía del Usuario de TotalChrom.*



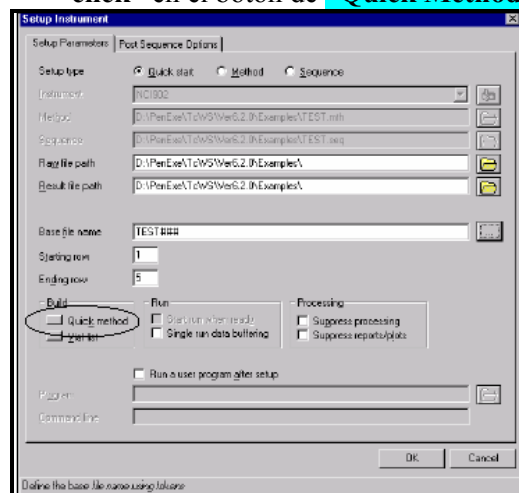
### Construyendo un Método Rápido

El botón de “Quick Method” en el cuadro de diálogo del “Setup” abre el Editor del Método Rápido, el cual es una versión limitada del Editor del Método. Usted puede acceder al instrumento y a los parámetros de procesamiento en el Editor del Método Rápido.

El botón de “Quick Method” ó Método Rápido también abre una serie de cuadros de diálogo en el cual usted fija los parámetros del instrumento. En cada uno de estos cuadros de diálogo usted selecciona las opciones y fija valores que son apropiados para el análisis que esta llevando a cabo y para el instrumento que usted seleccionó.

#### ➤ Para construir un Método Rápido:

1. En la ventana de diálogo de “Setup Instrument”, dar un “click” en el botón de “Quick Method”



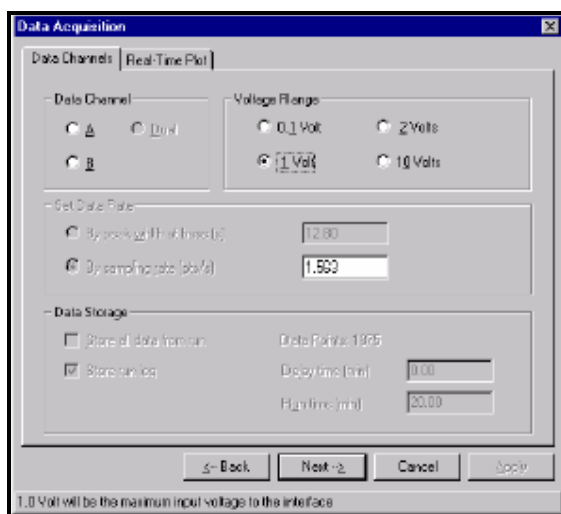
La ventana de Editor de Método Rápido se abrirá , mostrando la ventana de diálogo de la Documentación. Éste es el primero de la serie de ventanas que se desplegarán automáticamente.

2. Usted puede escribir cualquier información descriptiva sobre el método o dar un “click” en Next para dejar el espacio en blanco. **No Seleccione audit Trail.**

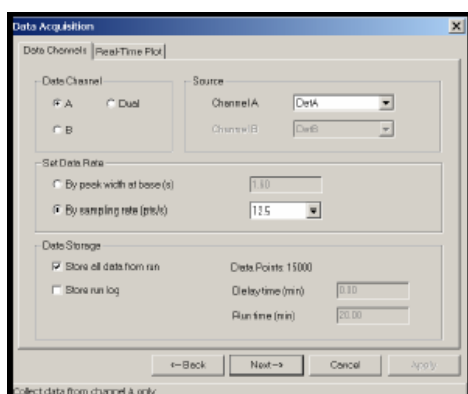
La siguiente ventana que aparecerá es la identificada como “Instrument Notes”

3. Usted puede fijar cualquier información específica del instrumento ó elegir una del menú desplegable de plantillas prediseñadas para el instrumento. O quizás ud. prefiera dejar el espacio en blanco, en tal caso, haga “click” en **NEXT** para pasar a la siguiente ventana identificada como **“Data Acquisition”**

La información desplegada en el cuadro de **“Data Channels”** varía, dependiendo del instrumento que usted seleccionó al principio de este procedimiento. Esto se muestra en las siguientes dos figuras:



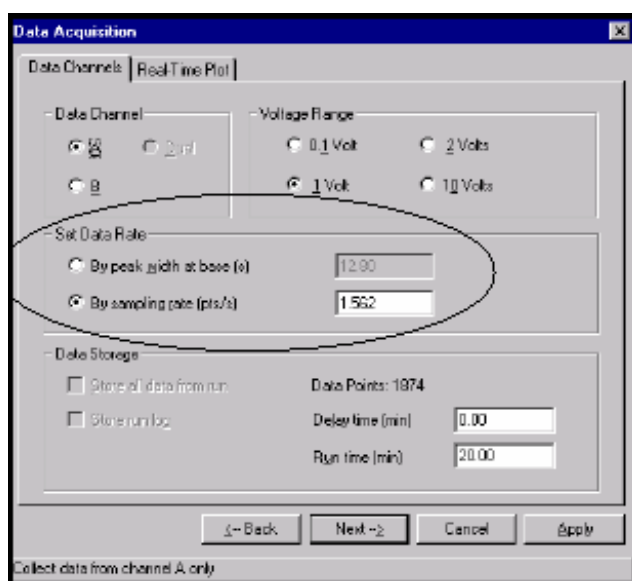
*Ventana de Data Channels para una Interface de la Serie 900/NCI*



*Ventana de Data Channels para un instrumento controlado por Interface Link*

## Tutorial Parte I

4. En **"Data Channel"** seleccionar el canal ( A, B, o Dual) , aquella que iguale la salida de su detector a la interface.
5. *Para un instrumento controlado por LINK*, seleccione una fuente del datos de la lista desplegable (algunos instrumentos no proporcionan una opción).  
**O**  
*Para una Interface series 900/NCI*, seleccione el rango de voltaje requerido que corresponda a la salida de su detector.
6. Seleccione una opción en **"Set data Rate"**



Si usted conoce que tan amplio es su pico más estrecho de la línea base , seleccione **"By peak width at base"** y fije el número de segundos en el cuadro de texto. TotalChrom utilizará este valor para calcular la velocidad de muestreo óptima para ese pico

ó

Elija **"By sampling rate"** y seleccione ó fije una velocidad (dependiendo del instrumento).

Las velocidades de muestreo sugeridas son :

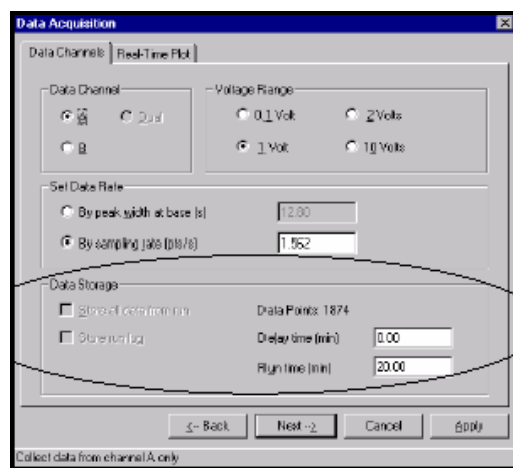
|                     |   |            |
|---------------------|---|------------|
| GC capilar          | = | 20 pts/sec |
| HPLC o CI           | = | 5 pts/sec  |
| Columna Empacada GC | = | 2 pts/sec  |

7. Nosotros queremos guardar la corrida completa en lugar de utilizar el **"delay"** y **"run times"** para almacenar solamente parte de esta.

*Para un instrumento controlado por LINK, seleccione **"Select all data for run"***

ó

*Para una Interface series 900/NCI, deje **"Delay Time"** en 0, y fije un **"Run Time"** que corresponda a l tiempo de su corrida*



8. Seleccione **NEXT** para mostrar la primera de una serie de ventana de diálogo para el instrumento que usted selecciono
9. Complete cada una de la serie de ventanas de diálogo utilizando los valores apropiados para la muestra y equipo. (Debido a que las personas que siguen esta guía didáctica están utilizando una variedad de equipo, nosotros no podemos anticipar las entradas específicas.)

---

**Nota:** Presionando la tecla F1 cuando una ventana de diálogo esta abierta desplegara la Ayuda en línea para esa ventana

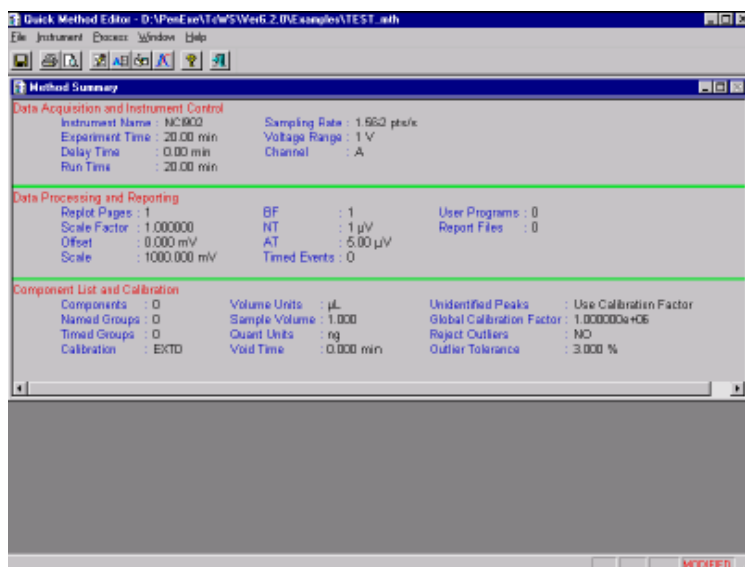
---

Los cuadros de diálogo desplegados en el resto de esta serie dependerán del instrumento que usted seleccionó y de los módulos del instrumento. Nosotros no fijaremos ningún parámetro de procesamiento para este método rápido. Es a menudo más fácil fijar estos parámetros en la ventana de Editor Grafico del Método. Nosotros utilizaremos esta función en la Parte 2 del Tutorial

Cuando usted llegue a la ventana de diálogo de los Componentes, la cual es la última ventana de la serie para todos los instrumentos, dar un **"click"** en **"Finish"**

## Tutorial Parte I

Cuando usted complemente todos las ventanas de diálogo del “**Quick Method**”, el Resumen del Método, La Lista de componentes, o una combinación de estas, las dos ventanas se desplegarán mostrando los parámetros iniciales que usted haya fijado .



➤ **Para guardar el “Quick Method”:**

1. Elija “**Save**” del menú “**File**” para guardar el método.  
El método rápido es guardado utilizando el nombre de archivo base que usted fija en el cuadro de “**Setup**” además de la extensión **.MTH** (Por ejemplo, **TEST.MTH** para este tutorial).
2. Elija “**Exit**” del menú “**File**” para regresar a la ventana del diálogo del “**Setup**” del Instrumento
  - Para mayor información sobre parámetros del instrumento , Ver el capítulo 6 “Desarrollando Parámetros del Instrumento en el Metodo” de la Guía de Usuario del Totalchrom
  - Para mayor información acerca de métodos rápidos, Ver Utilizando Metodos Rapidos. En el Capítulo 12 de la Guía del Usuario de TotalChrom.

Aunque no se requiere para todas las configuraciones del instrumento, la próxima tarea a realizar en esta guía didáctica será construir una lista de viales para especificar las muestras a ser inyectadas

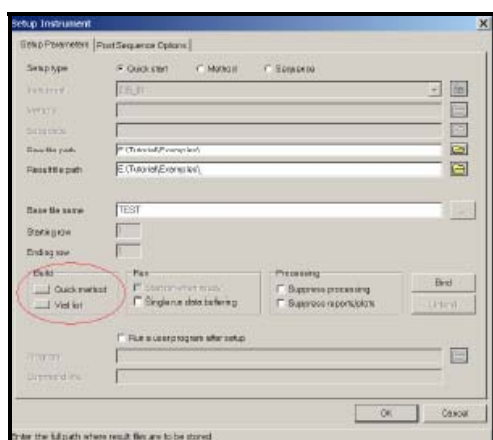
## Construyendo una Lista de Viales

Usted puede construir una lista de viales para cualquier instrumento, pero este es solamente requerido si esta utilizando un automuestreador controlado por LINK. Nosotros construiremos una lista de viales para familiarizarnos con esta parte de TotalChrom.

El botón de Lista de viales en el cuadro del diálogo del “Setup Instrument” abre una versión limitada del Editor de la secuencia . Además de fijar los números de viales , también se puede escribir el nombre y numero de la muestra , el numero de rack (si es aplicable), sitio de la inyección (si usted está utilizando un GC – controlado por Link) . Hay otras columnas que no se usan en el Quick Star del Setup

➤ Para construir una Lista de Viales:

1. En la ventana de diálogo del “Setup Instrument”, de un click” en el botón de “Vial list”



Esto abre la ventana de Lista de Viales con toda la información de la secuencia:

Sequence Editor - Vial List - E:\Tutorial\Examples\TEST.seq

File Edit Change Format View Window Help

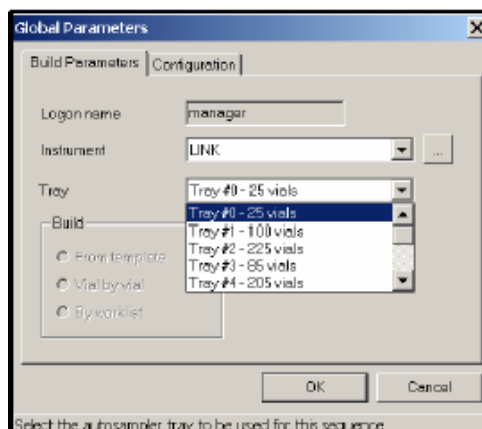
Sequence Information

| Row | Name | Number | Rack | Vial | Sample   | Am | Int      | Std | Am    | Sample   | Vol | Dil | Factor |
|-----|------|--------|------|------|----------|----|----------|-----|-------|----------|-----|-----|--------|
| 1   |      | 0      | 1    |      | 1.000000 |    | 1.000000 |     | 1.000 | 1.000000 |     |     |        |
| 2   |      | 0      | 2    |      | 1.000000 |    | 1.000000 |     | 1.000 | 1.000000 |     |     |        |
| 3   |      | 0      | 3    |      | 1.000000 |    | 1.000000 |     | 1.000 | 1.000000 |     |     |        |
| 4   |      | 0      | 4    |      | 1.000000 |    | 1.000000 |     | 1.000 | 1.000000 |     |     |        |
| 5   |      | 0      | 5    |      | 1.000000 |    | 1.000000 |     | 1.000 | 1.000000 |     |     |        |
| 6   |      |        |      |      |          |    |          |     |       |          |     |     |        |

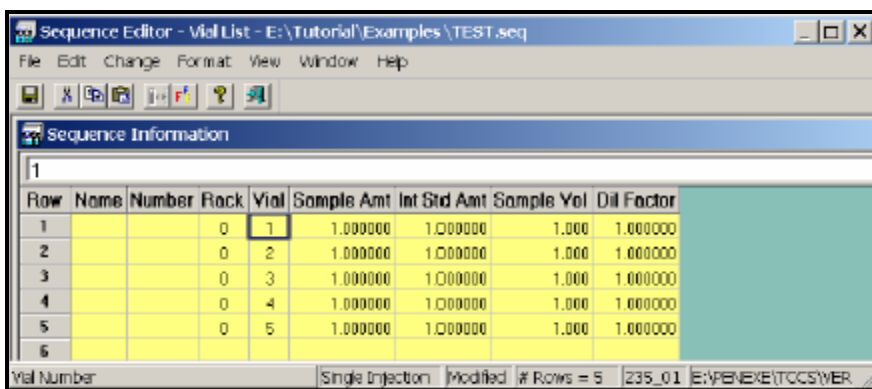
Name: Single Injection Modified: # Rows = 5 235.01 E:\PENE\TCCSWER

## Tutorial Parte I

2. Si usted está utilizando un automuestreador LC –controlado por LINK, usted deberá indicar el tipo de charola.
  - a. Elija **“Global Parameters”** del menú **“Change”** para desplegar el menú de Parámetros Globales



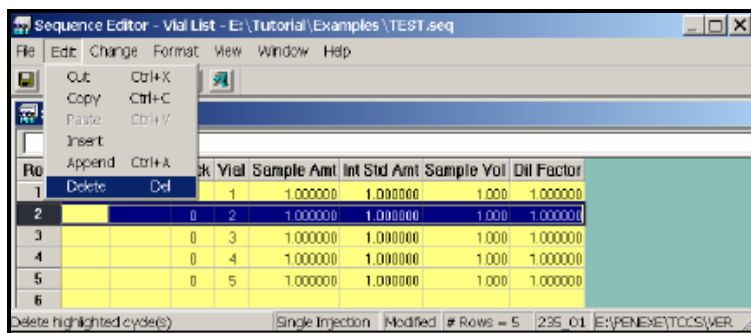
- b. Seleccione el tipo de charola instalada en su automuestreador del menú desplegable de la lista de charolas
  - c. Dar un **“click”** en **OK**.
3. En la ventana de Información de la secuencia, seleccionar la primera celda de la columna de viales, haciendo un **“click”** en esta.



4. Para un automuestreador controlado por LINK , fije el numero de vial de acuerdo a la posición en donde este colocado el vial de la muestra  
*Para todas las otras configuraciones del instrumento, deje la entrada predefinida.*
5. No fije Ninguna entrada de vial , por el contrario borre las líneas del 2 al 5

6. Resalte la fila 2 y después despliegue el menú **"Edit"**

Note que usted tiene varias opciones por manipular las filas en la hoja de cálculo y que cada una tiene un menú corto



7. Elija **"Delete"** del menú de **"Edit"**. La línea 2 se borra y las líneas 3 y 5 se desplazan hacia arriba en la hoja de calculo
8. Borre la líneas remanentes de la misma manera

*Usted ha completado la lista de viales y esta listo para guardar la información e iniciar la corrida*

➤ **Para guardar la Lista de Viales:**

1. Seleccione **"Save"** del menú **"File"**

La lista de viales es guardada como una secuencia (de 1 ciclo en este caso), utilizando el nombre base del archivo que usted fijo en el cuadro de diálogo del Setup, además de la extensión .SEQ (TEST.SEQ en este tutorial)

2. Seleccione **"Exit"** del menú **"File"** para cerrar la ventana de lista de viales y regresar a la ventana de diálogo del **"Setup Instrument"**
3. Elija **"OK"** del cuadro de diálogo del **"Setup Instrument"** para inicializar el instrumento y regresar al Navegador.

*Para más información, revise " Construyendo una Lista de Viales" en el Capítulo 12 de La Guía de Usuario de TotalChrom.*

**Usted ha completado todo lo que necesita para adquirir datos**

**Usted está listo para inyectar su estándar y adquirir los datos.**



## Tutorial Parte I

---

### Inyectar su Estándar y Adquirir sus Datos

Ahora que usted ha completado el procedimiento del Setup y el instrumento se reinicializo, el texto en el cuadro del "Status" en el Navigator , indica que el instrumento está Listo. (Los otros mensajes desplegados en el cuadro del "Status" dependeran del tipo de instrumento que usted está utilizando.)



➤ **Para iniciar la adquisición de datos:**

La manera en que usted iniciara la corrida dependerá de sus instrumentos y de cómo están conectados.

- Para un *Automuestreador controlado por LINK* , dar un "click" en el icono de **RUN** y después elija **STAR RUN** del menu



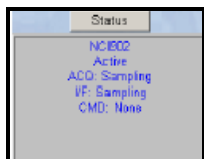
ó

- Para un cromatografo con automuestreador conectado a A/D , el A/D debera ser sincronizado para iniciar el muestreo cuando el automuestreador inyecte . En este caso solamente inicie su instrumento

ó

- Para un instrumento sin automuestreador, inyecte su estándar en el cromatografo . Si su cromatografo esta conectado a una LINK , presione STAR en el cromatografo. Si su cromatografo esta conectado a A/D , entonces presione el botón de star en el panel frontal

Cuando inicia la corrida, la ventana de **Status** indica que el instrumento esta activo y muestreando



Para más información, vea "Controlando la Adquisición de datos" en el Capítulo 12 de la Guía del Usuario de TotalChrom.

### Observando la Grafica de tiempo real

El icono de **Real Time Plot** le permite desplegar una grafica de los datos que están siendo adquirido por una interfase

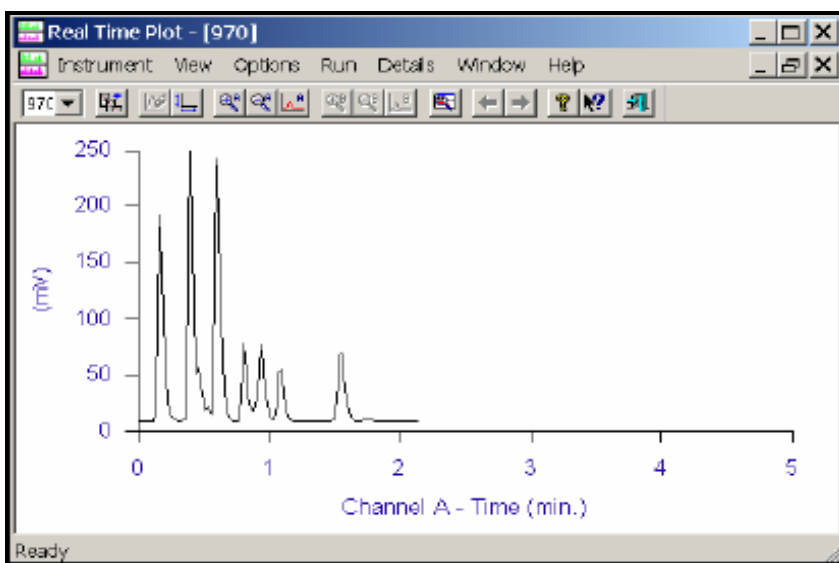
➤ **Para abrir la ventana de Time Real Plot:**

En la ventana de Navegador , dar un “click” en el icono de **“Real Time Plot”** , para abrir la ventana de la Grafica



Los parámetros para el display inicial vienen de la ventana de **“Real Time Plot”** que usted complemento en el método rápido aceptando valores predeterminados.

Hay varias cosas que usted puede hacer en la ventana de la Grafica de tiempo real . Nosotros experimentaremos con cambios en el display del menu de **OPTIONS** . Los cambios del display son temporales y afectan solamente a la corrida actual , no cambian los valores del método y no afectan la adquisición de datos.



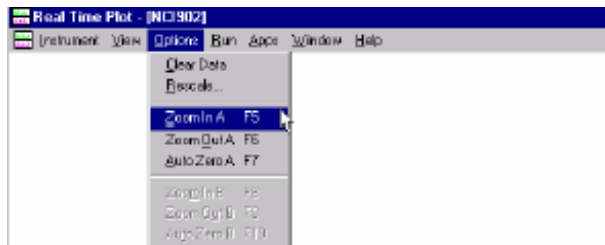
## **Amplificando la Grafica de Tiempo Real**

Los comandos **“Zoom In”** y **“Zoom Out”** del Menú de **“Options”** permiten aumentar y reducir la escala vertical de la grafica de tiempo real de los datos que están siendo recolectados

**“Zoom In”** disminuye el valor del eje del voltaje, aumentando por lo tanto el tamaño de los picos y revela más detalles acerca de los datos que se están adquiridos . Por el contrario **“Zoom Out”** dobla aquel valor , reduciendo el tamaño de los picos.

➤ **Para Zoom In y Zoom Out de la gráfica real:**

1. En la ventana de **“Real-Time Plot”** , seleccione el menú de **“OPTIONS”**:



2. Elija **“Zoom In”** (para el canal que usted quiera ver)
3. Elija **“Zoom In”** de nuevo hasta que el vista sea tan grande como usted quiera ver
4. Elija **“Zoom out”** hasta que la grafica regrese a su tamaño original

---

*Nota: Usted puede amplificar o reducir la grafica con las teclas F5 y F6 mientras la muestra este corriendo*

---

**“Zoom In”** y **“Zoom Out”** actúan sobre el valor de la escala completa para el eje del voltaje , reduciendo y aumentando el valor de este respectivamente . El siguiente paso será cambiar el valor del voltaje explícitamente de la ventana de la opción de **“Rescale”**

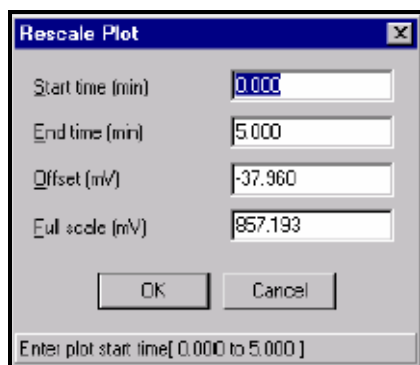
## Tutorial Parte I

### Re escalando una Grafica

El comando de **“Rescale”** del menú de **“Options”** le permite cambiar los parámetros de la escala de la grafica mientras los datos están siendo adquiridos.

➤ **Para cambiar los parámetros de la escala en la ventana de Real time:**

1. En la ventana de **“Real Time Plot”**, elija **“Rescale”** del menú de **“Options”** para abrir la ventana de diálogo de **Rescale**.



Abajo del Eje de Voltaje, el valor de la escala completa es el valor que se está usando actualmente para la grafica .. Este valor puede ser (a) del método, (b) si es alterado por el amplificador o (c) como usted lo especifico en esta ventana

2. Doble el valor en el cuadro de **“Full scale”**, después elija **OK**

La grafica vuelve aparecer con un nuevo valor en el eje de las Y, lo cual reduce a la mitad el tamaño de pico desplegado (el mismo efecto que el **zooming out**)

Usted puede continuar experimentando con la grafica mientras la muestra esta corriendo.

3. Permita que la corrida termine y los datos sean procesados.

6

Si la corrida aun no termina y usted está listo para continuar con el tutorial, usted puede detener la corrida seleccionando **“Stop Run”** del menú **“Run”**. Esto sería útil si por lo menos un pico se ha detectado.

4. Para cerrar la ventana de **“Real Time Plot”**, elija **“Exit”** del menú de **“Instrument”** para regresar ala ventana del **Navigator**.  
Cuando la corrida termine (o ud. la detenga), se imprimirá el reporte y la gráfica

*Para mayor información, revise la sección de " Graficas de Tiempo real" del Capitulo 12 de la Guía del Usuario del Totalchrom*

## **Tutorial Parte I**

---

Una vez que usted haya adquirido una corrida puede utilizar el archivo de datos almacenados para optimizar los parámetros procesados. Usted puede hacerlo utilizando el Editor Grafico del Método. Nosotros utilizaremos esta función en la parte 2 del Tutorial.

Primero, revisaremos la grafica impresa

### **El Informe Impreso y la Grafica**

Si su impresora esta conectada y encendida, se imprimirán un reporte y una grafica después del análisis de resultados . Revisemos rápidamente estas impresiones. Ambos fueron formateados utilizando los valores predeterminados,

La parte superior del reporte contiene información del método, tales como los datos del canal y el tiempos de corrida . Estos datos y la información del propio informe, son configurables. Nosotros personalizaremos un reporte en la parte 2 de este tutorial.

El encabezado de la grafica también muestra información de la identificación . La forma en que la grafica se imprime también se puede configurar en el método (este no tiene ninguna relación con la escala de la grafica de tiempo real.)

---

***Nota:** Nosotros no reutilizaremos ninguno de los archivos creado en esta parte del tutorial En la parte 2 s utilizaremos archivos del TotalChrom.*

---

**Usted ha completado la Parte 1 de la guía didáctica de TotalChrom.**

- **Usted necesitará otros 35 a 45 minutos para ir a través de la parte 2 , la cual se deberá completar en una sesión**
- **Si es necesario usted puede detenerse aquí y continuar en otra ocasión**

---

***Nota:** Cada paso en el resto del tutorial se construye y es una continuación de pasos previos . Por consiguiente, usted necesita completarlo en conjunto.*

---

# Tutorial Parte 2

---

## Optimización de un Método utilizando el Editor Grafico

En esta parte del tutorial utilizara algunas de las funciones básicas del Editor Grafico del método para:

- Cambiar la vista de la grafica
- Ajustar los parámetros de detección de pico
- Crear una lista de componentes

Un método contiene los parámetros que determinan cómo analiza los datos crudos el TotalChrom. Con el Editor Gráfico del Método, usted puede ajustar aquellos parámetros del método y observar los efectos del cambio inmediatamente.

El Observar los datos en forma gráfica ayuda a determinar si los picos están siendo detectados correctamente, si la línea base está colocada apropiadamente, y si los tiempos de retención esperados y las ventanas de investigación para los componentes están identificando a los picos exactamente

Para editar un método en el Editor Gráfico del Método, usted especifica un archivo de datos crudos, el cual representa un cromatograma del análisis que usted quiere optimizar. TotalChrom procesa el dato crudo con el método que es referenciado en el título del archivo crudo y entonces muestra el cromatograma, mostrando el resultado de la integración y la identificación de picos.

*Para mayor información acerca el Editor Gráfico del Método, vea Capítulo 10 en La Guía de Usuario de TotalChrom.*

## Tutorial Parte 2

---

### Abriendo al Editor Gráfico del Método

Nosotros empezaremos por abrir el Editor Gráfico del Método y mostrar un cromatograma que ya haya sido optimizado..

**Nota:** Debido a que nosotros necesitamos trabajar con algo conocido en esta parte del tutorial , no utilizaremos el método rápido y archivo resultante de la Parte 1.

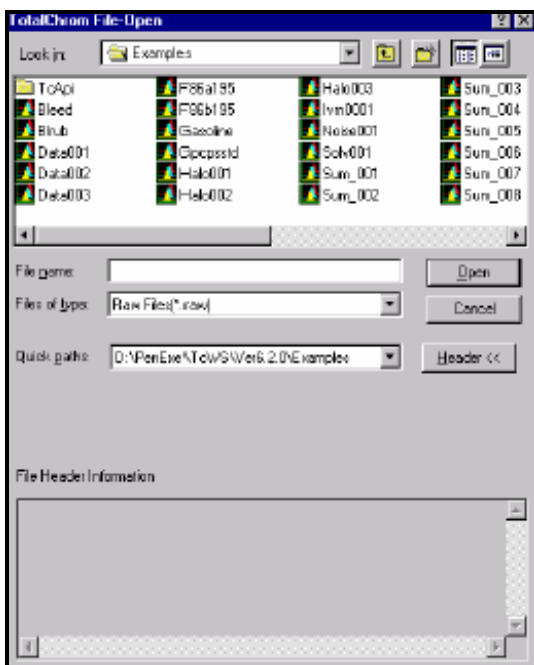
---

➤ **Para abrir el Editor Grafico del Método y cargar un archivo:**

1. En el Navegador, dar un “click” en el icono de **“Gráfico Edit”** ó Editor Grafico

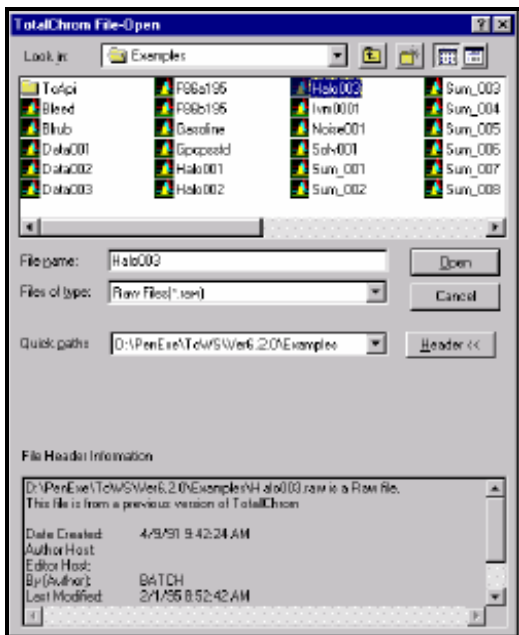


La ventana del Editor Gráfico del Método se abre , así como una ventana de selección de archivos mostrando una lista de los archivos crudos



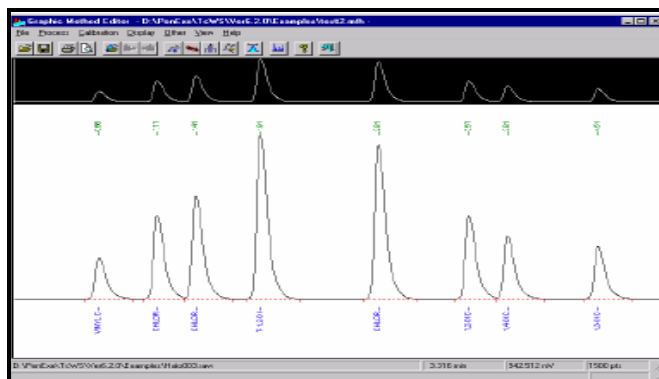
2. Seleccione el directorio de **“Examples”** del path del TotalChrom Quick ó de la lista de directorios.

3. De la lista de archivos del directorio de Ejemplos, seleccionar **halo003.raw**



4. Elija **“Open”**

La grafica de default muestra un *chromatograma de trabajo* en el área principal de la ventana y un *chromatograma de referencia* arriba de este. El nombre del archivo crudo de datos aparece en la barra de status y el nombre del método utilizado para procesar los datos aparece en la barra del título.



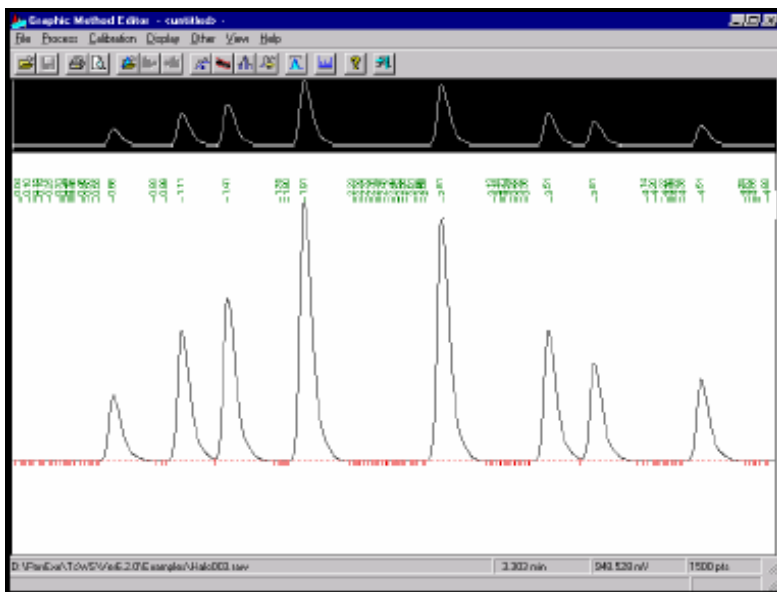


## Tutorial Parte 2

En los siguientes pasos, nosotros exploraremos algunas de las maneras que se puede utilizar para optimizar un método y llegar a alcanzar este tipo de resultados.

***Nota:** Para este tutorial, nosotros crearemos un método poco satisfactorio, de modo que nosotros tengamos algo para optimizar. El paso de abajo es para ese propósito; este no es el procedimiento normal.*

- **Para regresar los parámetros del método a los valores de “default” :**  
Elija **“New”** del Menu de **“File”**  
Los parámetros de default del método son aplicados al archivo **halo003.raw**.



*Antes de cambiar cualquier parámetro del método cambiaremos la manera en que la información cromatográfica se muestra*

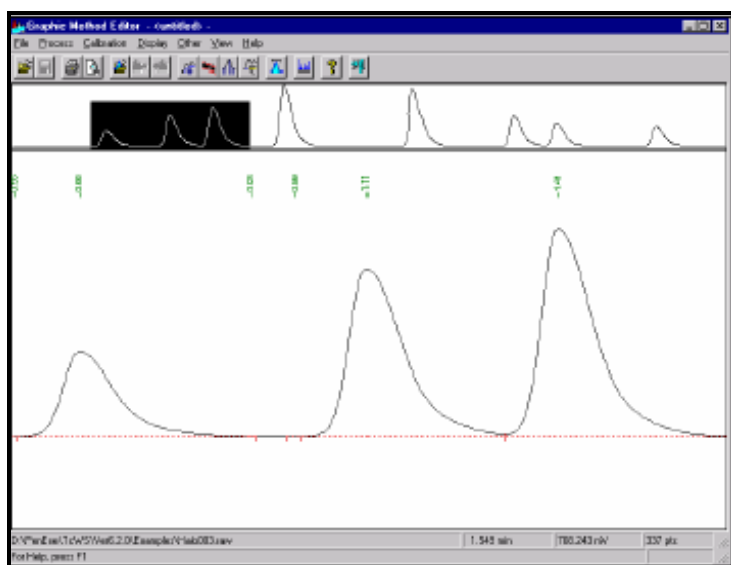
### Cambiando el display de la Grafica

Hay varias maneras de cambiar la vista de la grafica. Nosotros experimentaremos con dos de ellos en esta parte del tutorial

Usted puede utilizar el **mouse** para cambiar la vista resaltando el área de la gráfica que usted quiere expandir . Nosotros haremos esto del cromatograma de referencia; de modo que usted pueda hacer esto en el cromatograma de trabajo

➤ **Para seleccionar y manipular una parte del cromatograma de referencia:**

1. Seleccionar una parte del cromatograma de referencia como se muestra en el ejemplo de abajo , oprimiendo el botón izquierdo del **mouse** y arrastrando el **mouse** para sombrear el área.



2. Suelte el botón del **mouse**

El cromatograma de trabajo se expande para igualar el área resaltada del cromatograma de referencia.

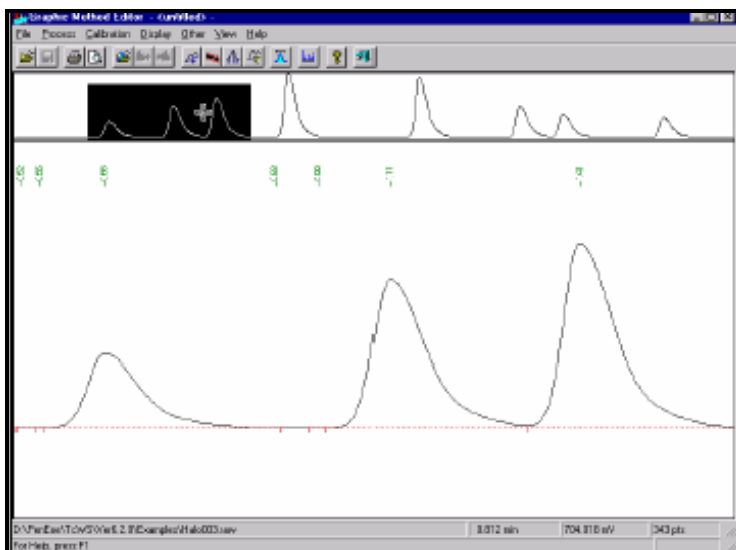
Note que el cromatograma de trabajo iguala el área resaltada exactamente, de modo que cualquier pico cuya altura completa no se seleccione será truncada

- 3 Mueva el cursor (la flecha) en el área resaltada del cromatograma de referencia

## Tutorial Parte 2

---

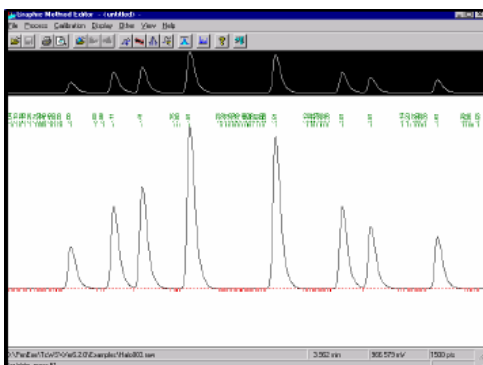
El cursor del *mouse* cambia a un *cursor de cruz*. Esto indica que usted puede mover el rectángulo de la selección.



4. Oprima el botón izquierdo del *mouse* y arrastre el rectángulo de selección a otro parte del cromatograma de la referencia.
5. Libere el botón del *mouse*

El cromatograma de trabajo se actualiza para mostrar la nueva área resaltada en el cromatograma de la referencia.

6. Coloque el cursor en cualquier parte del cromatograma de trabajo, después de un "click" en el botón derecho para restablecer el cromatograma a su escala original

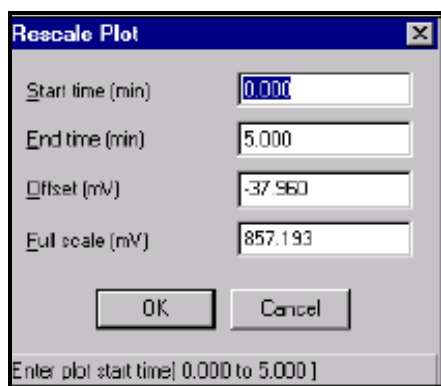


Si usted movió el rectángulo más de una vez, oprima el botón derecho del *mouse* hasta que el cromatograma regrese a su escala original. Un mensaje será desplegado cuando no haya más expansiones

Enseguida nosotros cambiaremos la vista alterando directamente los valores que definen este . Nosotros queremos ver sólo el área que esta antes del primera pico para tener una vista detallada del ruido de la línea base , de modo que nosotros empecemos optimizar el método.

➤ Para reescalar la grafica y mostrar el área de interés:

1. Con el cromatograma de regreso a su posición original mostrando la corrida completa , elija **“Rescale Plot”** del menú **“Display”**

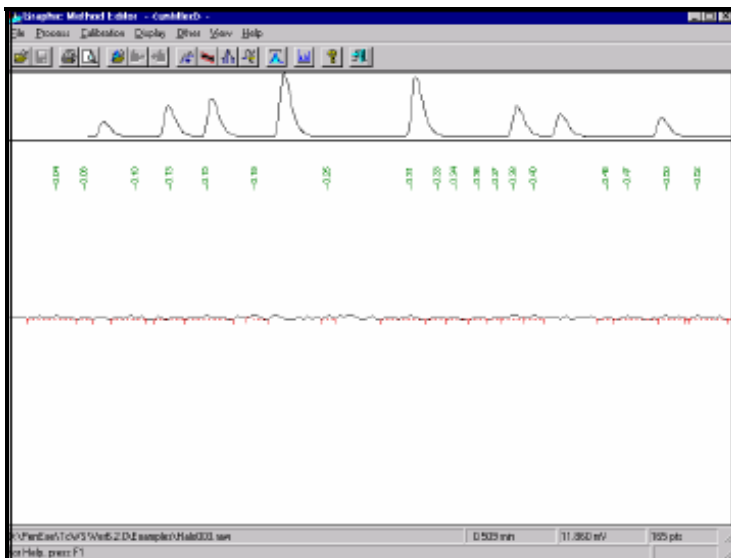


2. En la ventana de dialogo de **“Rescale Plot”**, efectúe los siguientes cambios:
  - a. Cambie el **Star time** a 55.
  - b. Cambie el **offset** a 0
  - c. Cambie el **Full Scale** a 10
3. De un **“click”** en **OK** para re dibujar la grafica con los nuevos valores.

## Tutorial Parte 2

---

Su pantalla deberá aparecer similar al ejemplo de abajo



*Para información adicional sobre cambiar la vista , vea las "Opciones del Cambio del Display" Capítulo 10 de la Guía del Usuario de TotalChrom.*

### Afinación de Detección de Picos

Debido a que los valores pre establecidos de detección de picos son muy sensibles , se detectaron demasiados picos en el cromatograma y la línea base apareció muy ruidosa

Para asegurar que el Totalchrom detecta picos muy pequeños , no interprete el ruido de la línea base como picos , nosotros debemos calcular el ruido de la línea base y el área de rechazo para ignorar esto.

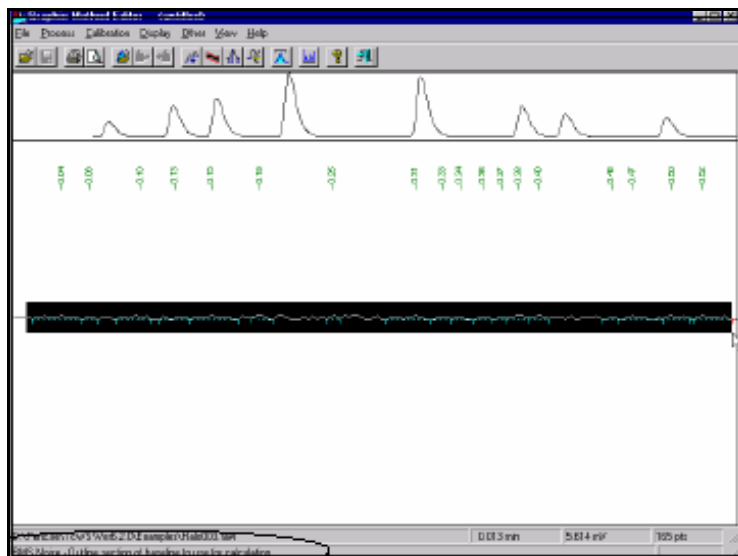
#### ➤ **Para calcular el ruido optimo:**

1. Elija **"ThresholdNoise/Area"** del menú de **"Process"**

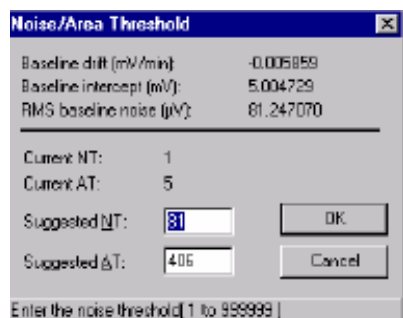
La barra de status de le sugiere sombrear la sección de la línea base que usted quiera utilizar calculando un nuevo nivel del umbral.

## Tutorial Parte 2

2. Seleccione la línea base completa sosteniendo el botón izquierdo del **mouse** y arrastrándolo para sombrear el área.



3. Suelte el botón del **mouse** para mostrar la ventana de **“Threshold Noise/Area”**



|                          |           |
|--------------------------|-----------|
| Baseline drift (mV/min): | -0.005859 |
| Baseline intercept (mV): | 5.004729  |
| RMS baseline noise (µV): | 61.247070 |
| Current NT:              | 1         |
| Current AT:              | 5         |
| Suggested NT:            | 81        |
| Suggested AT:            | 406       |

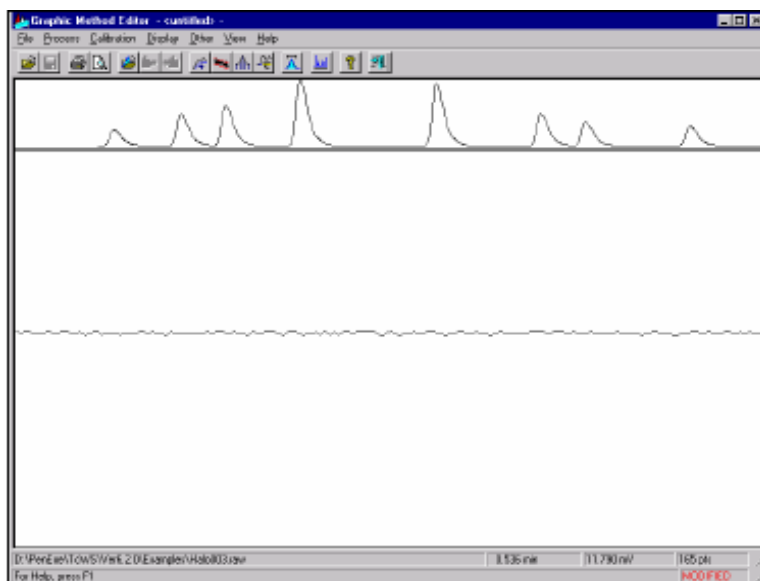
Enter the noise threshold (1 to 999999)

El TotalChrom ha calculado los umbrales óptimos sugeridos (éstos deberán ser aproximadamente 80 y 400).

4. De un **“click”** en **OK** para reprocesar los datos y re dibujar la grafica utilizando los umbrales sugeridos.

## Tutorial Parte 2

Como se muestra en el ejemplo de abajo, los nuevos valores de ruido y área, han eliminado los picos espurios.



6. Pulse el botón derecho del **mouse** para regresar el cromatograma a su nivel de expansión anterior (el cromatograma del tamaño completo ).

El número de puntos del dato a través de un pico influye en la detección de picos . Si usted también tiene demasiado puntos a través del pico , usted puede disminuir la velocidad de muestreo para corridas futuras de la muestra (usted no puede cambiar la velocidad de muestreo para datos que ya han sido coleccionados) ó aumentar el “**bunching factor**” para filtrar datos innecesarios de archivos existentes.

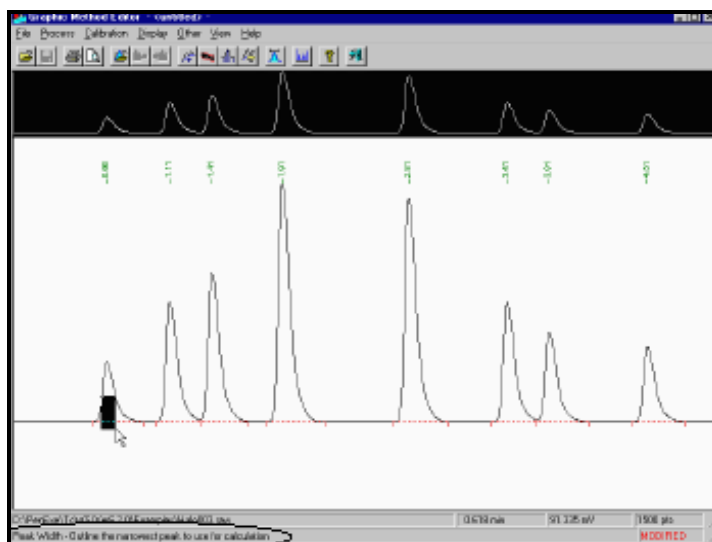
**El siguiente paso que haremos será optimizar la detección de picos para ajustar el bunching factor**

➤ Para fijar un nuevo bunching factor:

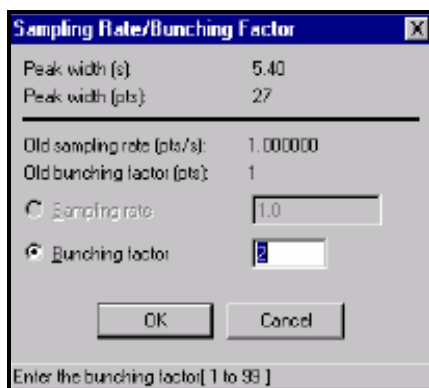
1. Elija “**Samplig Rate/ Bunching Factor**” del menú de “**Process**”

El mensaje de la barra de status le dice como sombrear el pico mas estrecho para utilizar en el calculo .

2. Sombree el ancho del primer pico (no seleccione la porción de coileo) oprimiendo el botón izquierdo del *mouse* y arrastrando el *mouse*



2. Libere el botón del *mouse* para mostrar la ventana de dialogo de “Sampling Rate/Bunching Factor”



En el ejemplo de arriba el Totalchrom ha calculado un “**bunching factor**” de 2 (comparado con el “**bunching factor**” anterior de 1 del método de default).

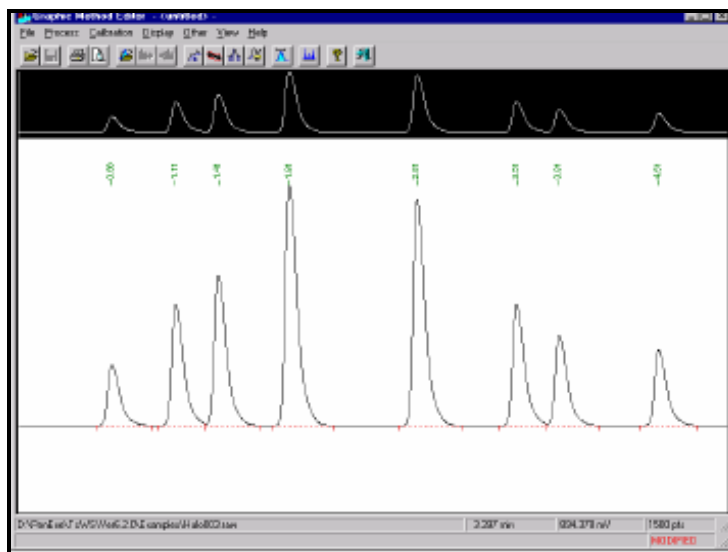
4. Con la opción de “**bunching factor**” seleccionada , seleccione **OK** para reprocesar el dato y re dibujar el cromatograma utilizando el nuevo “**bunching factor**”



## Tutorial Parte 2

---

El cambio en nuestro cromatograma es mínimo, cuando optimice un método en sus rutina de trabajo, los cambios visibles pueden ser significantes



*Para mayor información , ver la sección de “Fijar los Parámetros de Procesamiento” del capítulo 10 de la Guía de Usuarios del Totalchrom*

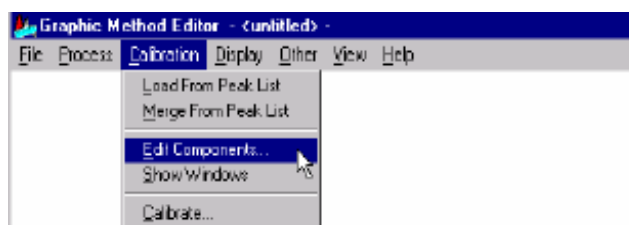
**Ud. ha optimizado el método para la detección de picos e integración. El siguiente paso es asignar el nombre a algunos de los picos y calcular la cantidad ó (concentración) de los picos. Para hacer esto debe de crear una lista de componentes**

### Creando una lista de componentes

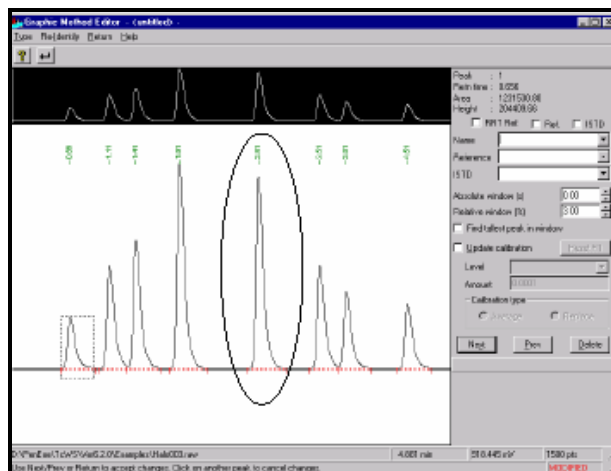
Durante la detección de picos, el Totalchrom asigna un numero secuencial a cada pico detectado . Este es conocido como la lista de picos. Por otro lado la lista de componentes es una lista que ud. crea en el método la cual identifica cada pico como un componente específico. Crearemos tres componentes en este ejercicio.

#### ➤ Para adicionar un solo pico:

1. Seleccionar **“Edit Componentes”** del menú de **“Calibration”**



La grafica es reducida para que aparezca la ventana de **“Edit Componentes”**:



2. Dar un **“click”** al pico 5 (tiempo de retención de 2.81) para mover el rectángulo a este pico
3. Seleccione el cuadro de Ref. para que este componente actúe como pico de referencia para los otros componentes.

El pico de referencia se utiliza para ajustar los tiempos de retención esperados durante la identificación de los componentes

4. Seleccionar el cuadro de **ISTD** para que este componente actúe como el estándar interno de los otros componentes

## Tutorial Parte 2

El estándar interno ajusta la respuesta por cualquier variación en el volumen de inyección

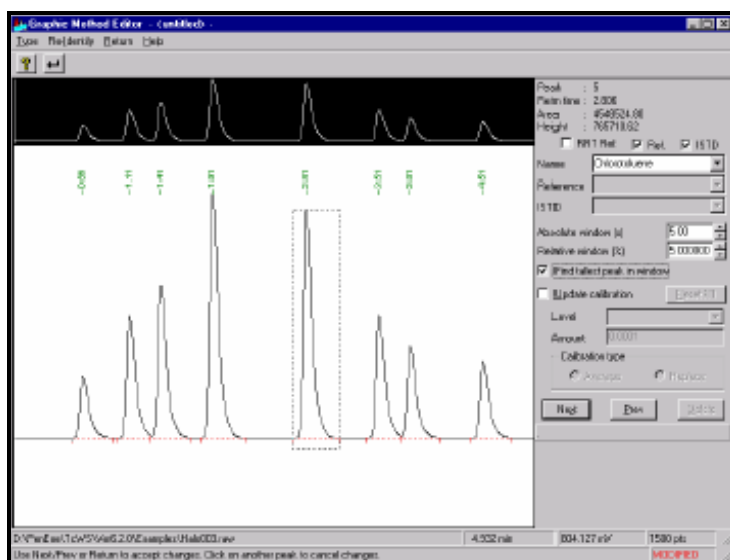
5. Escriba Chlorotoluene en el cuadro de nombre del componente
6. Cambie a 5 los valores de **"Absolute Window"** y **"Relative Window"**

La ventana de investigación total es la suma de las ventanas absolutas y relativas, se aplica a cualquier lado del tiempo de retención esperado del componente

7. Seleccione el cuadro de **"Find Tallest Peak."**

Esto identificara al pico mas alto que eluya en la ventana de investigación del componente designado.

Esto completa las entradas para este pico. La ventana deberá ser semejante a la ventana de abajo.



8. Seleccione **"Prev"** para mover el rectángulo de selección al pico 4

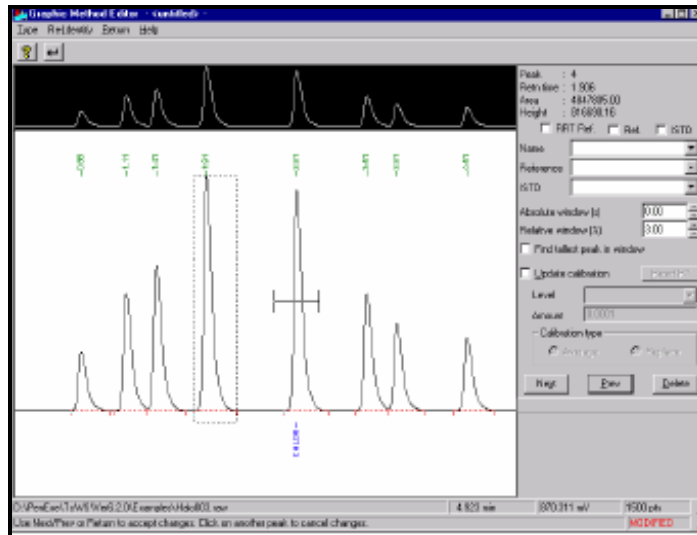
---

**Nota:** Para guardar la información del componente, usted **debe** elegir Next, Prev ó Return. Si ud. se mueve a otro pico en lugar de hacer lo anterior, los cambios no se guardaran. Esto por el contrario descarta las entradas que ud. no quiere guardar.

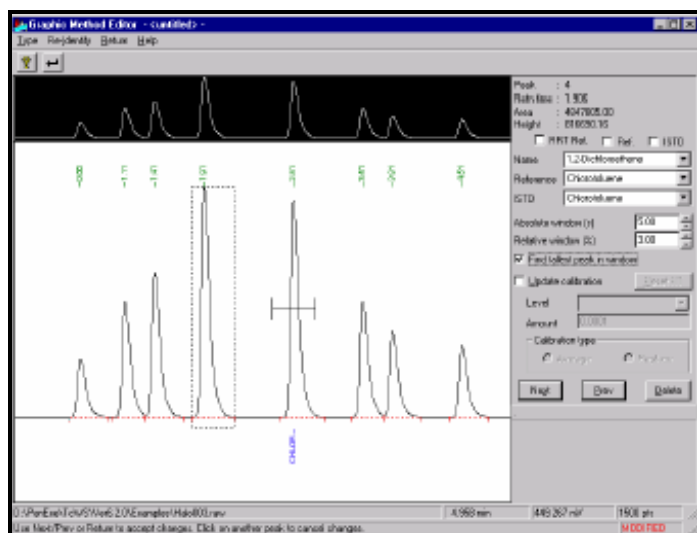
---

## Tutorial Parte 2

Su pantalla se deberá ver igual que en el ejemplo de abajo, con el nombre del componente abajo del pico 5 y con el pico 4 seleccionado pero no designado



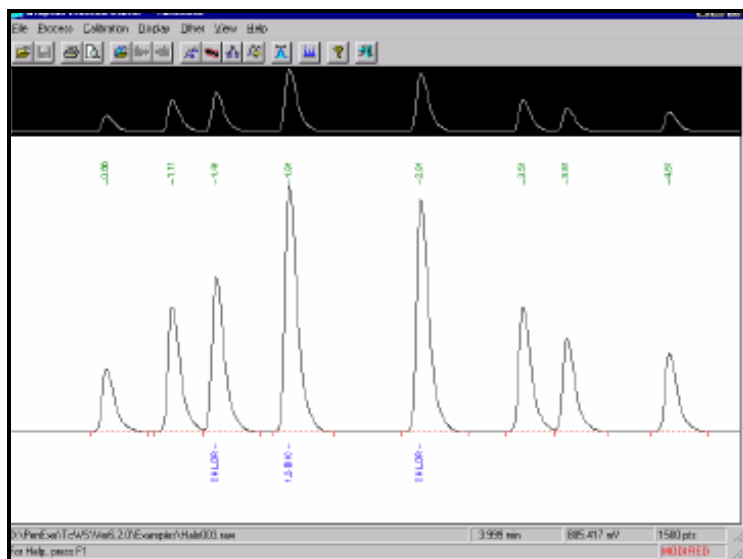
9. Para el pico 4 , escriba 1,2 Dichloroetheno como el nombre del componente.
  10. En la ventana de “Reference” y ISTD, seleccione Chlorotoluene
  11. En la ventana de “Absolute Window” cambie el valor a 5 (deje el valor de 3 en el cuadro de Relative Window)
  12. Seleccione el cuadro de “Find Tallest Peak”.
- La ventana deberá ser igual que el ejemplo de abajo:



13. Seleccione “Prev” para mover el rectángulo de selección al pico 3

## Tutorial Parte 2

14. Escriba **Chloroform** como el nombre del pico 3
15. Seleccione **Chlorotoluene** del cuadro de “Reference” y “ISTD”
16. Escriba el valor de 5 en el cuadro de “Absolute Window” (deje el valor de 3 en el cuadro de “Relative Window”)
17. Seleccione el cuadro de “Find Tallest Peak”
18. Elija “Return”  para cerrar la ventana de dialogo



Su cromatograma deberá estar etiquetado con los tres componentes que usted acaba de editar

*Para mayor información revise “Trabajando con componentes” del capítulo 10 de la Guía de Usuarios del Totalchrom*

**Ud ha finalizado la edición de la Lista de componentes que necesitamos para este tutorial. El siguiente paso es modificar el Editor del Método y fijar los parámetros de calibración para cada componente**

## Utilizando el Editor del Método

En esta parte del tutorial ud:

- Fijara los parámetros de calibración
- Llevara a cabo una calibración manual

Ud. utilizara el Editor del Método para desarrollar un método completo. Esto incluye los parámetros que no están disponibles a través del Editor Grafico del método ó cuando en el desarrollo de un método rápido.

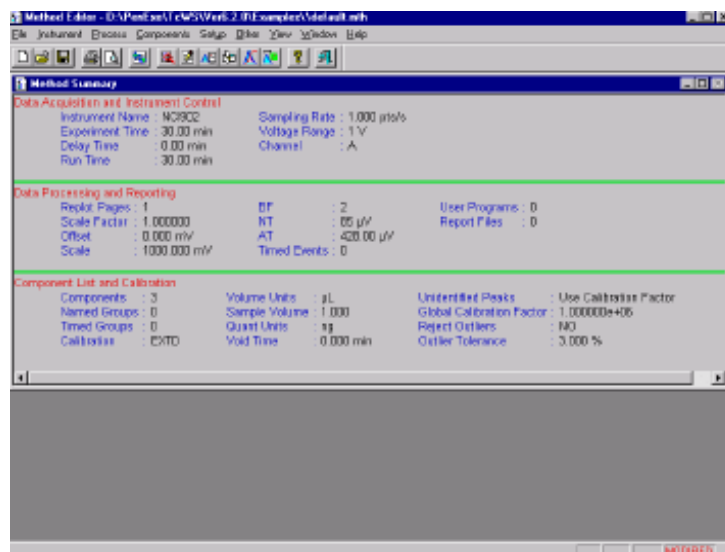
### Fijando los parámetros de calibración

Los parámetros de calibración identifican y calibran los componentes que están siendo analizados por el método. Estos parámetros incluyen los nombres de los componentes, los tiempos de retención esperados y los datos de calibración (las respuestas producidas por diferentes cantidades de los componentes).

Ud. fijo los nombres y los tiempos de retención cuando edito la lista de componentes en la sección previa de este tutorial. En esta parte del tutorial, ud fijara los parámetros de calibración remanentes en el Editor del Método adicionando niveles de calibración para cada componente

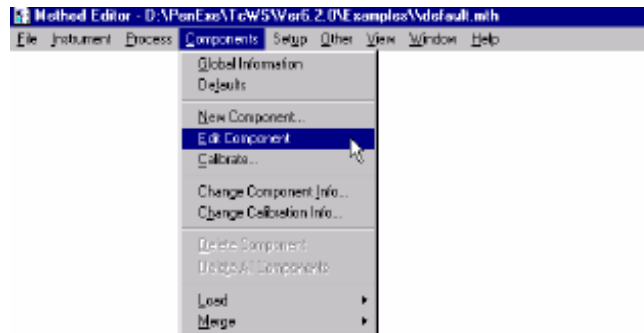
#### ➤ Para desarrollar parámetros de calibración en un Método:

1. Seleccione “**Method**” del Menu de “**Other**” para cambiarse al Editor del Método y mostrar el resumen de la información para cada sección del método.

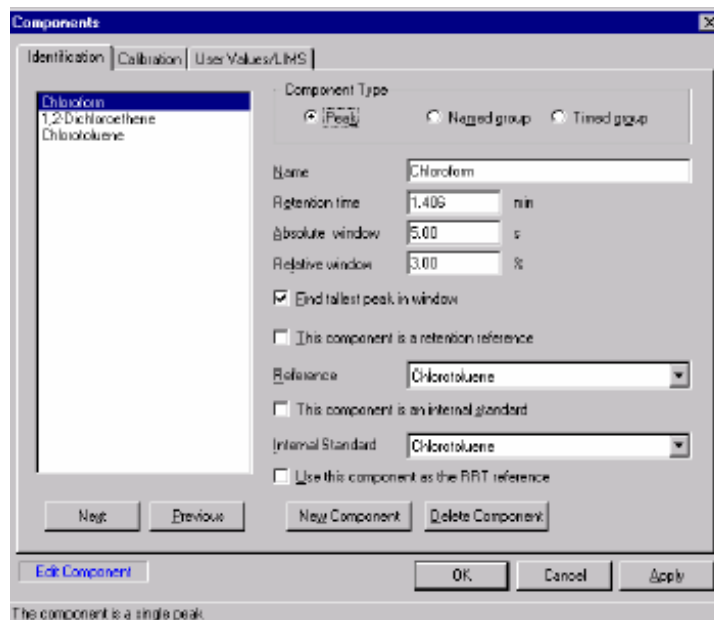


## Tutorial Parte 2

2. Seleccione **"Edit Component"** del menú de **"Components"**, para abrir la ventana de componentes

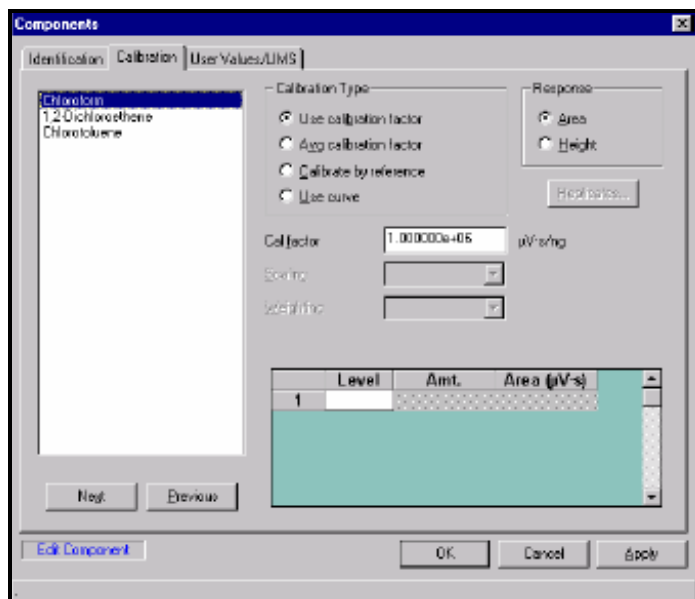


Esta ventana es un nivel secundario del Editor del Metodo.



Los nombres de los componentes que queremos identificar en el análisis están en el lado izquierdo de la ventana. La información para el componente seleccionado está en el lado derecho. Nosotros editamos esta información existente para adicionar un nivel de calibración para cada componente.

2. Seleccione Chloroform, y enseguida “**Calibration**” para abrir la ventana de calibración para este componente.



---

*Nota:* Los valores de arriba son los valores iniciales del Totalchrom. Los valores de default pueden ser diferentes en su sistema

---

4. Seleccione “**Use curve**” como el tipo de calibración  
Esto crea una curva de calibración basada en los datos recolectados del estándar
5. Seleccione “**Area**” como la opción de Respuesta.  
Esto indica al Totalchrom como calibrar y cuantificar utilizando el área del pico.
6. Seleccione “**Point to Point**” como el tipo de curva

Esto promedia todas las replicas (cantidades y respuestas) en cada nivel de calibración para derivar un punto . Cada par de puntos será conectado por un segmento de línea recta para formar una curva de calibración

7. Seleccione “**None**” en **Scaling y Weighting**.
8. En el cuadro de “**Origin Treatment**”, seleccione “**Include**”  
Esto adicionara (0,0) a la calibración (cantidad cero, respuesta cero)



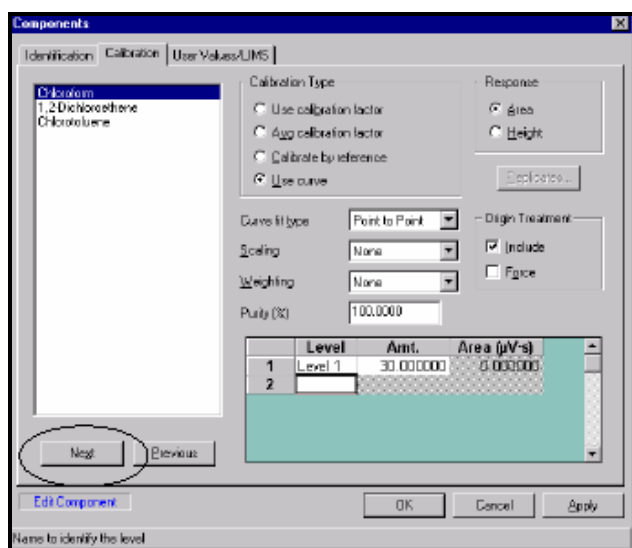
## Tutorial Parte 2

La siguiente parte del procedimiento describe como adicionar un nivel de calibración

|   | Level | Amt. | Area (µV-s) |
|---|-------|------|-------------|
| 1 |       |      |             |

9. Dar un “click” en el cuadro de **“Level”** y escriba 1  
Se recomienda escribir un valor alfanumérico en este cuadro.
10. Dar un “click” en el cuadro de **“Amt”** y escribir 30  
El valor del área será calculado y llenado cuando se corra un estándar
11. Si existen valores de default, seleccione cada entrada y oprima la tecla de **“Delete”** para borrar. Este es el procedimiento para borrar un nivel de calibración.

Una vez que usted seleccione el cuadro de **Level 2**, su pantalla deberá estar igual que en el siguiente ejemplo:



12. Elija **“Next”** para mostrar la información de calibración para el 1,2 Dichloroethene

13. Haga exactamente lo mismo para el 1,2 Dicloroetheno:
- Calibration Type = Use Curve  
Response = Area  
Curve Fit Type = Point to Point  
Scaling/Weighting = None  
Origin = Include  
Calibration level = Level 1  
Calibration amount = 30  
Delete the default calibration level entries, if any
14. Elija **Next** para mostrar la información de calibración para Chlorotoluene.
15. Haga lo mismo para el Chlorotoluene , excepto que en el nivel de calibración escriba 20 en lugar de 30:
- Calibration Type = Use Curve  
Response = Area  
Curve Fit Type = Point to Point  
Scaling/Weighting = None  
Origin = Include  
Calibration level = Level 1  
**Calibration amount = 20**  
Delete the default calibration level entries, if any
16. Elija **Apply** , después **Ok** para regresar a la ventana de Resumen del método

**Ahora que ud. ha terminado de adicionar un nivel de calibración para cada componente, tenemos todo lo necesario para llevar a cabo una calibración manual**

### Llevando a cabo una calibración manual

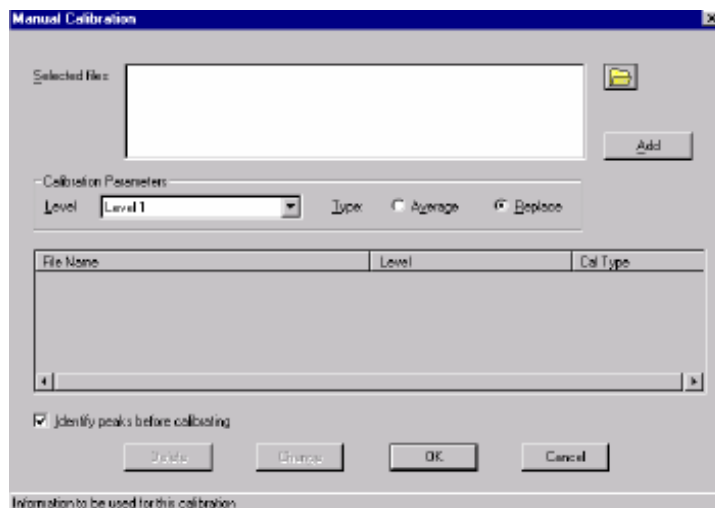
Cuando ud. calibra manualmente un método , esta creando una *replica de calibración*. Una replica es el análisis de un estándar de calibración para un nivel de calibración en particular. Debido a que este es un análisis único , puede utilizar las replicas para promediar las calibraciones.

Cuando lleve a cabo una calibración manual , construirá una lista de archivos resultantes y los niveles de calibración que usted quiera calibrar indicando el tipo de calibración que quiera llevar a cabo.

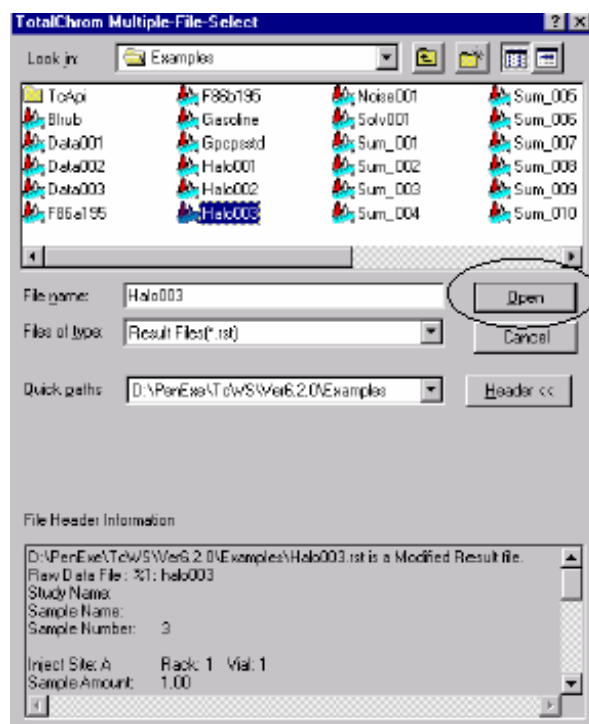
## Tutorial Parte 2

➤ Para llevar a cabo una calibración manual:

1. Elija “**Calibrate**” del menú de “**Components**” para abrir la ventana de Calibración

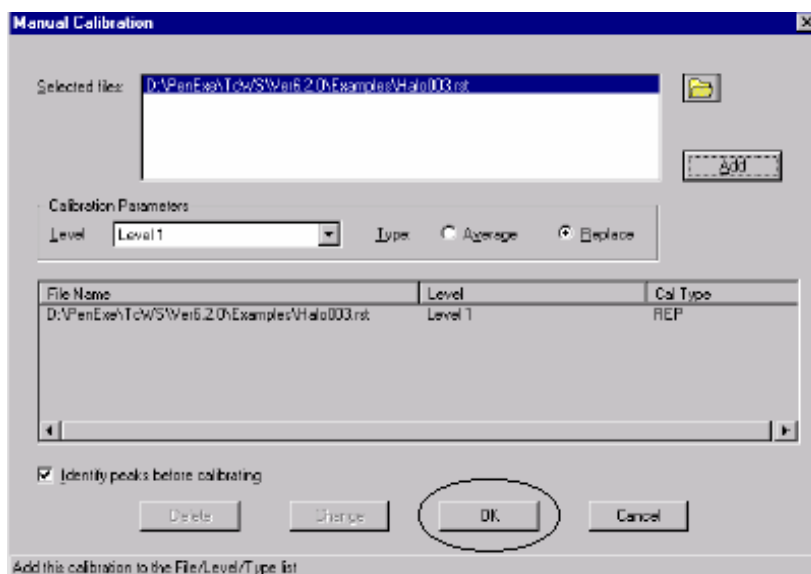


2. Dar un “click” en el folder amarillo para abrir el directorio de ejemplos, enseguida seleccione de la lista de archivos la corrida **Halo003.rst**



Seleccionar el cuadro de “**Open**”. Este será el archivo que nosotros definiremos como el estándar de calibración

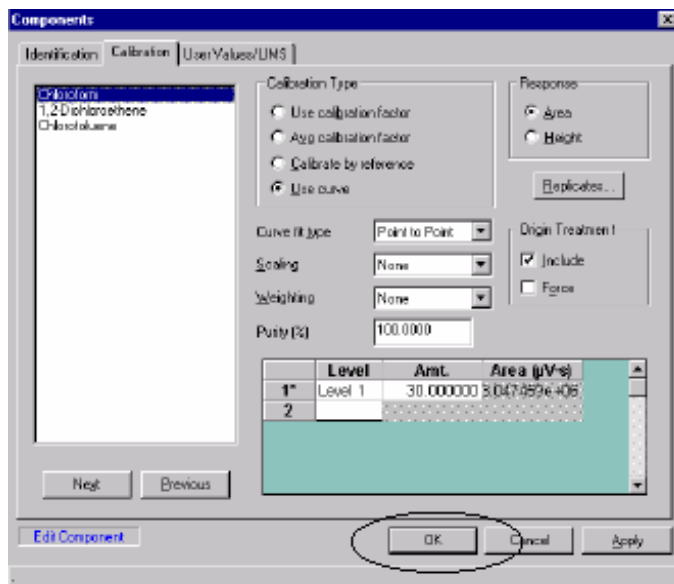
3. Seleccione el Nivel 1 del cuadro de **"Level"**,  
Este será el nivel de calibración del archivo del estándar
4. Seleccione **"Replace"** en el cuadro de type  
Si el método ha sido calibrado , esto reemplazaría las replicas de calibración existentes con las nuevas replicas
5. Seleccione **"Add"** para adicionar la entrada de calibración a la Lista  
Si usted tiene que calibrar mas niveles , seleccione el siguiente archivo, nivel y tipo de combinación y adiciónela a la lista.
6. Seleccione el cuadro de **"Identify peaks before calibrating"** de tal manera que los picos de la calibración sean identificados antes de la calibración.  
Su pantalla deberá ser similar al ejemplo de abajo.



7. Elija **Ok** para llevar a cabo la calibración utilizando la información de la lista de File Name/Cal Type/ y regresar a la ventana de resumen del método.

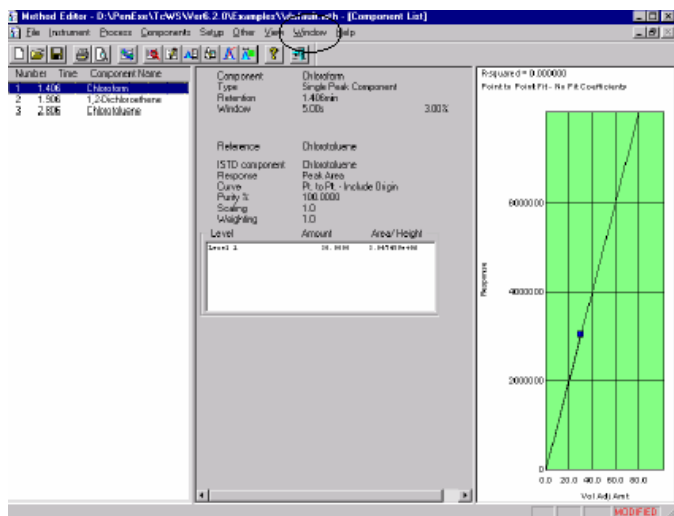
## Tutorial Parte 2

8. Para ver la calibración actualizada, regrese a la ventana de calibración seleccionando **"Edit Components"** del menú de **"Components"**



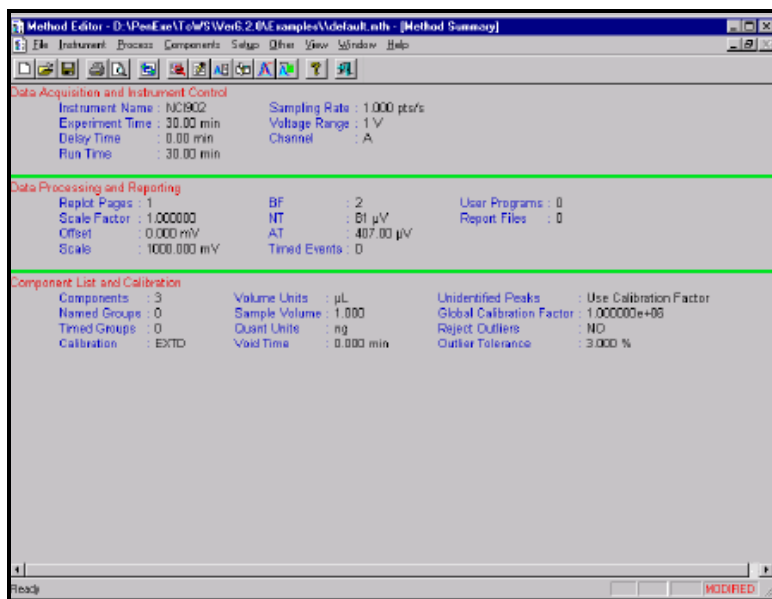
Observe que el área ha sido calculada y se muestra en la columna derecha de la ventana.

9. Elija **Ok** para regresar a la ventana de resumen del método.
10. Para observar la curva de calibración, ud. puede elegir **"Component List"** del menú de **"Window"** para cambiarse a la ventana de resumen del método



Ud. se puede cambiar de la ventana de Resumen del método y la Lista de Componentes minimizando y maximizando las ventanas en el editor del Método, dando “**click**” en la esquina superior derecha de la ventana de los iconos correspondientes.

11. Para regresar a la ventana de resumen del método, elija “**Window**” y seleccione “**Method Summary**”



*Para información adicional acerca de los parámetros de calibración, vea el capítulo 8 de la Guía de Usuario del Totalchrom*

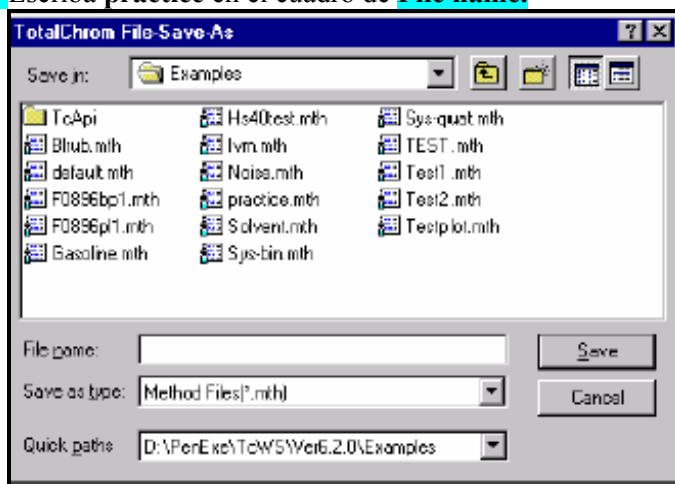
**A pesar de que existen muchas maneras de personalizar un método , esto complementa lo que haremos en este tutorial. Nuestro siguiente paso será guardar lo que hemos hecho**

## Tutorial Parte 2

### Guardando un método

➤ Para guardar este como un método nuevo

1. Elija **“Save”** as de menú de **“File”**
2. Cuando aparezca la ventana de descripción, escriba cualquier información que se desee almacenar con el archivo del método. **No seleccione Audit. Trail.**
3. Elija **OK**
4. Escriba **practice** en el cuadro de **File name.**



Esto guarda el método como (C:\penexe...\practice.mth)

5. Elija **“Save”** para guardar el método

**Ud. ha terminado de optimizar este método y lo ha guardado para usos futuros**

**El siguiente paso será crear un formato para el reporte que se imprimirá en un análisis que utilice este método**

## Construyendo un Formato de Reporte

Después de que el Totalchrom analiza un archivo de datos crudos, utiliza un archivo de formato de reporte para imprimir los resultados. Este archivo controla los parámetros que son incluidos en el reporte impreso y define como aparece la información en la pagina.

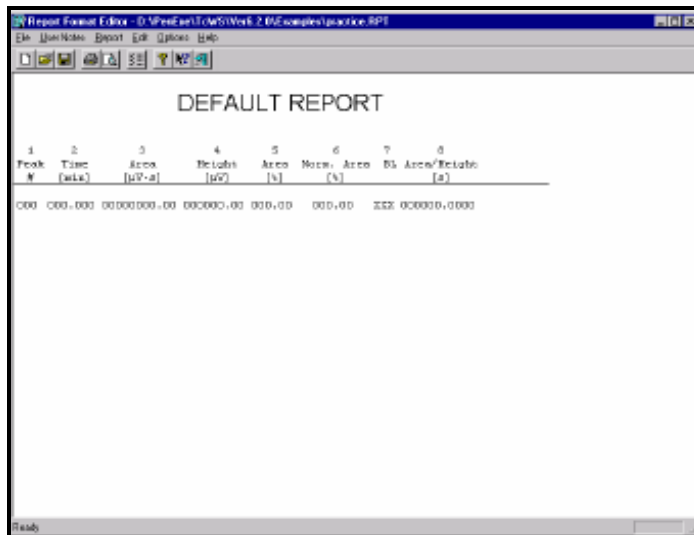
Para familiarizarnos con esta función, utilizaremos el Editor de Formato de Reporte para:

- Ponerle un titulo al reporte
- Adicionar, Reemplazar y Borrar columnas
- Guardar el reporte para usos futuros

### ➤ Creando un formato de reporte nuevo:

1. En la ventana de editor de método, seleccione la opción de “**Report Format Editor**” del menú “**Others**”.

Debido a que no se le da un nombre al formato de reporte, el Totalchrom utiliza el nombre del método que usted ha abierto con los valores de default para fijar un nuevo formato de reporte.



El primer paso será cambiar el titulo del reporte

2. Seleccionar “**Title**” del menú de “**User Notes**”
3. En el cuadro de **Title**, cambie el titulo de default a **TUTORIAL REPORT**
4. Dar un click en “**OK**” para mostrar el reporte con el nuevo titulo

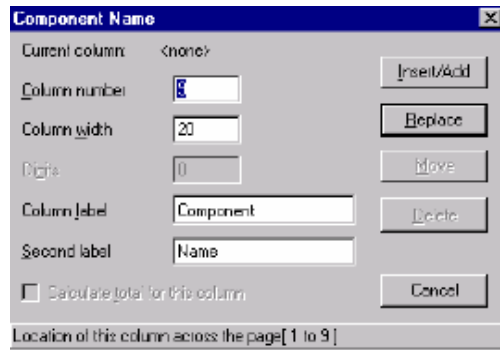


## Tutorial Parte 2

Ud. puede ver la mayoría de los cuadros editados dando un click directamente en el área que se desea cambiar (por ejemplo, de un click sobre **TUTORIAL REPORT** para mostrar el cuadro de dialogo del titulo).

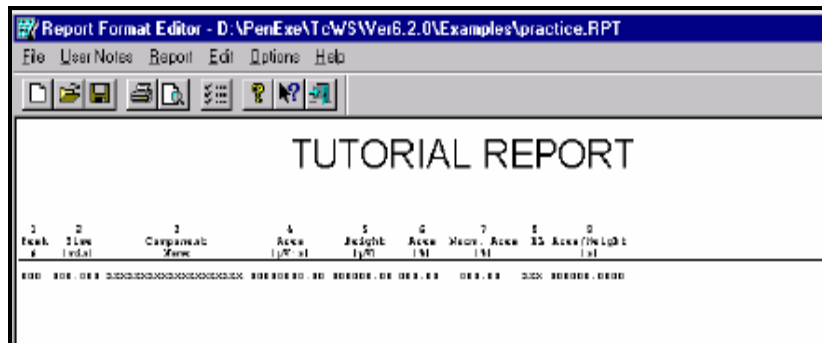
Enseguida adicionaremos una columna al reporte.

5. Para ver una lista de todas las opciones de los encabezados de la columnas, seleccione **Report** para ver el menú
6. Seleccione **Component Name** del menú de **Report**



7. En la ventana de **Component Name** cambie el numero de la columna de 9 a 3
8. Seleccione **Insert/Add**.

Ud. observara que se inserta una columna con los nombres de los componentes antes de la columna del área. La letra se hace mas pequeña, de tal forma que el reporte se ajuste en la pantalla, y se utilizara un tamaño de letra comprimido cuando se imprima el reporte.

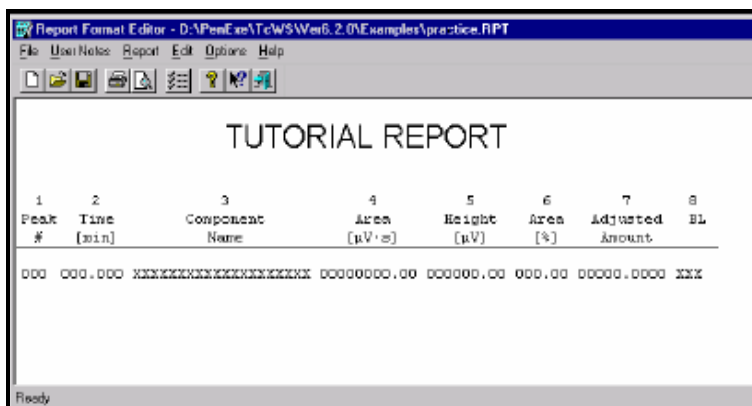


Ahora cambiaremos el encabezado de la columna reemplazándolo por una selección diferente



## Tutorial Parte 2

Observe que con menor numero de columnas la letra regresa a su tamaño original.



15. Elija **“Save”** del menú **“File”**
16. Elija **“Exit”** del menú **“File”** para regresar al resumen del método.  
No cierre la ventana de Editor del Método

*Para información adicional de formatos de reportes, vea el capítulo 9 de la guía del usuario del Totalchrom*

**Ahora que se ha optimizado y guardado el metodo practice, construiremos una secuencia que especifica este archivo de método optimizado**

## Construyendo una Secuencia

Las secuencias se utilizan para controlar la adquisición y análisis de datos cromatograficos producidos por una serie de inyecciones.

Para el objetivo de este tutorial, construiremos una secuencia que utilizaremos para reprocesar datos almacenados. Para hacer esto, utilizaremos la plantilla de secuencia y la hoja de calculo de la secuencia.

***Nota:** En muchos casos, se utilizara un archivo idx para reprocesar datos. Al final de esta sección veremos los archivos idx y su uso*

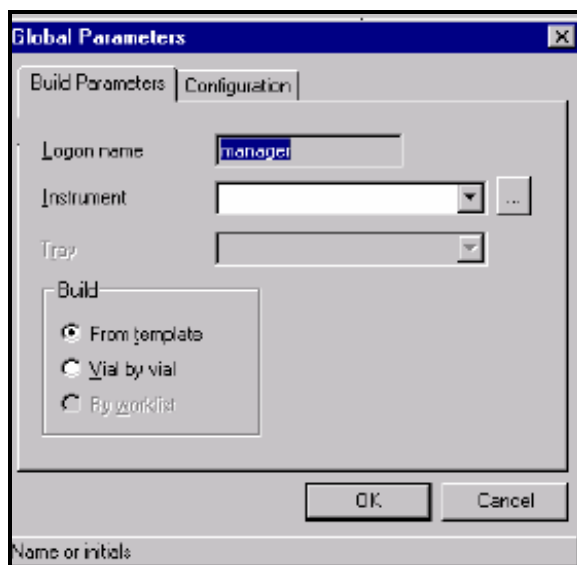
### Utilizando la Plantilla de Secuencia

La plantilla de secuencia simplifica el proceso de crear una secuencia ya que permite definir la estructura básica en una ventana de dialogo.

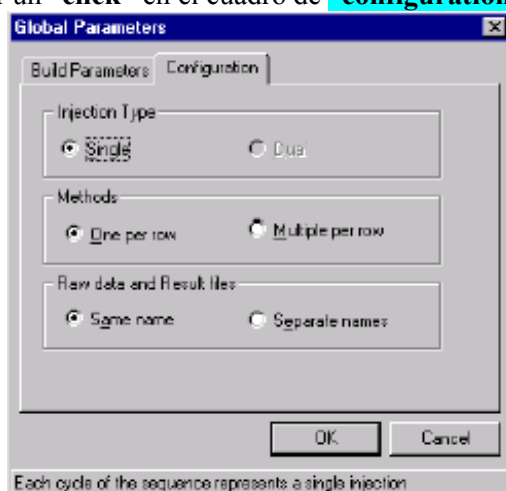
- **Para construir una secuencia utilizando una plantilla:**
  1. Con la ventana de Editor del método aun en la pantalla , elija **“Sequence Editor”** del menú **“Others”**

Con la ventana de Editor de Secuencia se abrirá también la Hoja de calculo de la secuencia. Nosotros regresaremos a esta mas tarde.

2. En la ventana de Editor de Secuencia, elija **"New"** del menú **"File"**  
Esto abre la ventana identificada como **"Global Parameters"**



3. En el cuadro de **"Build Parameters"**, seleccione el nombre de su instrumento en el cuadro de **Instrument**
4. Seleccione **"From Template"** de la opción de **"Build"**
5. Dar un **"click"** en el cuadro de **"configuration"**



6. Seleccionar **"Single"** en la opción de **"Injection Type"**
7. Seleccionar **"One per row"** para la opción de **"Methods"**

## Tutorial Parte 2

8. Seleccionar **“Same Name”** para la opción de **“Raw data”** y **“Result files”**
9. Seleccionar **Ok** para abrir la ventana de **“Sequence Template”**:

La ventana de dialogo es en donde se escribe toda la información que se necesita para crear una secuencia básica

10. En el cuadro de **“Study”**, escribe el nombre de tutorial para identificar el análisis que se esta llevando a cabo
11. En el cuadro de **“Method”**, dar un **“click”** en el fólder amarillo para seleccionar C:\pénese\...\practice.mth  
Utilizaremos el método optimizado para reprocesar un archivo crudo ya existente
12. Escriba **HALO** como el nombre base del archivo para el canal A

---

**Nota:** *HALO es el nombre de un grupo de archivos crudos que vienen como parte de los ejemplos del Totalchrom. No podemos utilizar el archivo crudo que ud. adquirió en la Parte I de este tutorial debido a que cada usuario tiene uno diferente*

---

Este será el nombre base del archivo crudo y de resultados que se enlistara en la hoja de calculo de secuencia

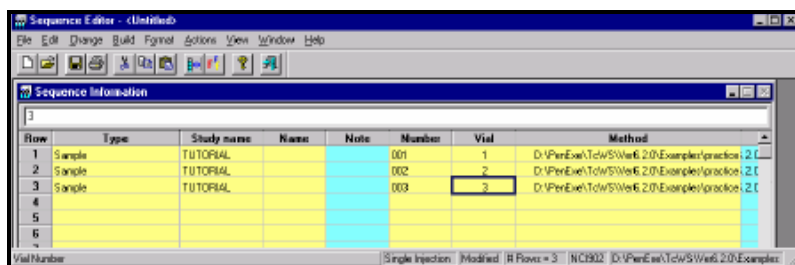
13. En el cuadro de calibración, desactive la opción de **“Include calibration standards”**. Nosotros ya hemos calibrado el método manualmente en el Editor del método

14. En el cuadro de Muestras, escriba **3** para el Numero de muestras que van a ser analizadas en la secuencia.
15. En el cuadro de numero de inyecciones escriba **1**
16. Elija **OK** para cerrar la ventana de la Plantilla de la secuencia

**Cuando ud. complete la plantilla de la secuencia, el Totalchrom construirá la secuencia. Ud puede ver y editar los datos de la secuencia en forma de hoja de calculo**

### Utilizando la hoja de calculo de la Secuencia

Los parámetros en una secuencia pueden ser mostrados en forma de una hoja de calculo en la ventana de información de la secuencia. Utilizar la hoja de calculo es la forma mas fácil para editar una secuencia ya existe.



The screenshot shows a window titled 'Sequence Editor - (Untitled)' with a menu bar (File, Edit, Change, Build, Format, Actions, View, Window, Help) and a toolbar. Below the toolbar is a 'Sequence Information' section containing a table with the following data:

| Row | Type   | Study name | Name | Note | Number | Vial | Method                                       |
|-----|--------|------------|------|------|--------|------|----------------------------------------------|
| 1   | Sample | TUTORIAL   |      |      | 001    | 1    | D:\PerEwe\Tch\SW6.2.0\Examples\practicoe-2.L |
| 2   | Sample | TUTORIAL   |      |      | 002    | 2    | D:\PerEwe\Tch\SW6.2.0\Examples\practicoe-2.L |
| 3   | Sample | TUTORIAL   |      |      | 003    | 3    | D:\PerEwe\Tch\SW6.2.0\Examples\practicoe-2.L |
| 4   |        |            |      |      |        |      |                                              |
| 5   |        |            |      |      |        |      |                                              |
| 6   |        |            |      |      |        |      |                                              |
| 7   |        |            |      |      |        |      |                                              |

At the bottom of the window, there is a status bar with the text: 'Vial Number: Single Injection: Modified: R Rows: 3 / NC802 D:\PerEwe\Tch\SW6.2.0\Examples\practicoe-2.L'

Su hoja de calculo de la secuencia deberá tener 3 renglones, es decir el numero de muestras que ud. especifico en la plantilla. Cada renglón contiene información relacionada con la muestra y los valores que serán utilizados cuando el archivo crudo sea reprocesado. Para ver las siguientes columnas e información tendrá que recorrer la ventana de la hoja de calculo a la derecha:

- La columna de **“Method”** muestra el nombre del archivo del método
- La columna de **“Report”** es el nombre del archivo de formato de reporte que será utilizado para generar el reporte
- La columna de **“Data”** identifica los archivos que serán reprocesados
- Cuando construya una secuencia para adquirir una serie de inyecciones, esta entrada será el nombre base del archivo de los archivos crudos que serán creados.
- Los parámetros que no cambie contienen los valores de **“default”**

---

**Nota:** Las columnas que son mostradas dependen de las opciones que fueron seleccionadas en Parámetros Globales, en el cuadro de configuración o definidas por el usuario

---

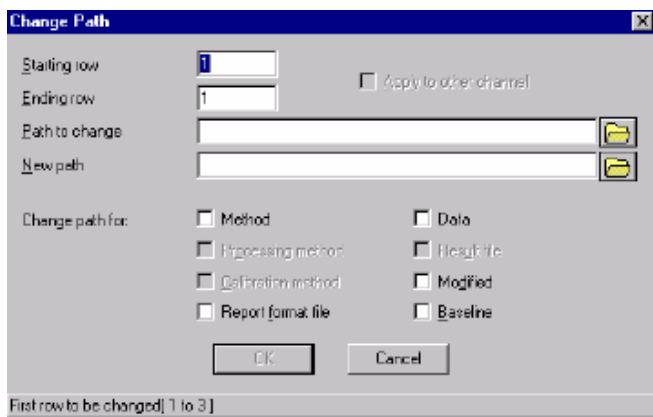
## Tutorial Parte 2

El menú de Edit es el mismo menú que vimos cuando desarrollamos la lista de viales en la parte I de este tutorial. Esto ofrece varias opciones para manipular las líneas de la hoja de calculo

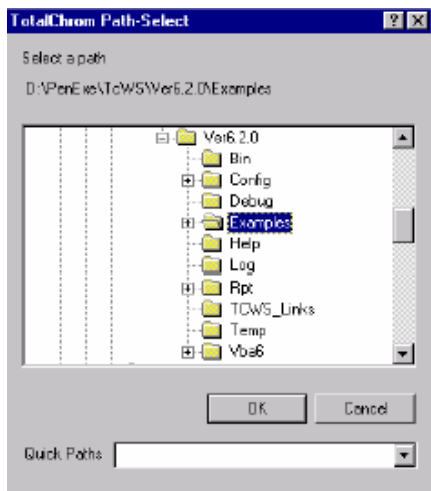
Nosotros utilizaremos el menú de Change para cambiar las rutas para los archivos de los datos de tal manera que el Totalchrom sabrá como buscarlos en el directorio de ejemplos en lugar del directorio de tutorial.

➤ **Para editar una secuencia utilizando la hoja de calculo:**

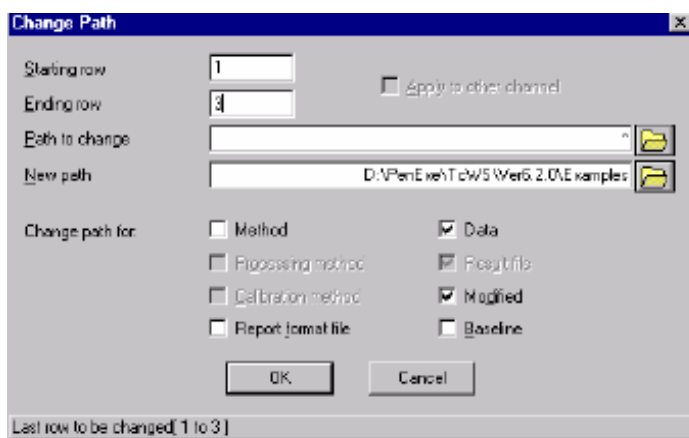
1. Elegir **"Path"** del menú **"Change"** para abrir la ventana de **"Change Path"**



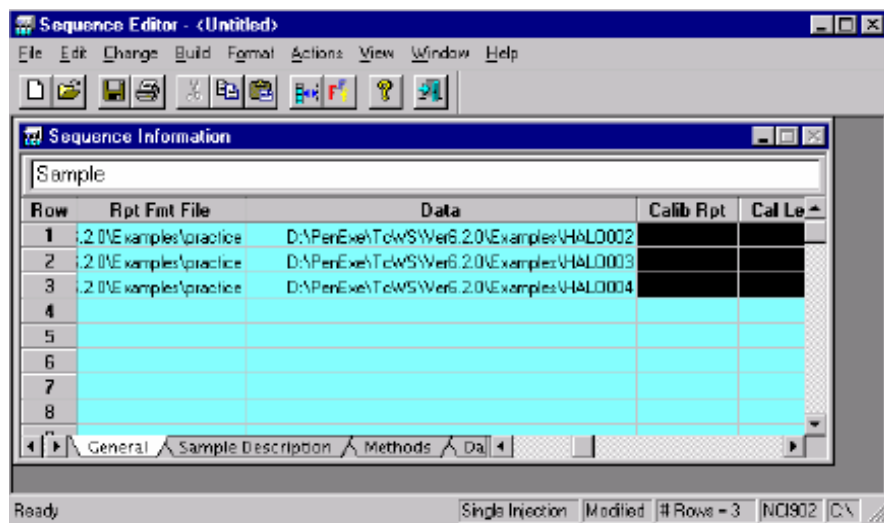
2. Escribir 3 en la línea final
3. Escribir un asterisco \* en el cuadro de **"Path to change"**
4. En el cuadro de **New Path**, dar un **"click"** en el folder amarillo



5. Debajo de **“Change path for”**, seleccione **“Data”**



6. Seleccione **OK**  
 Ud. observará que la ruta completa es ahora mostrada en la columna de **“Data”** y que este ahora señala al directorio de Ejemplos



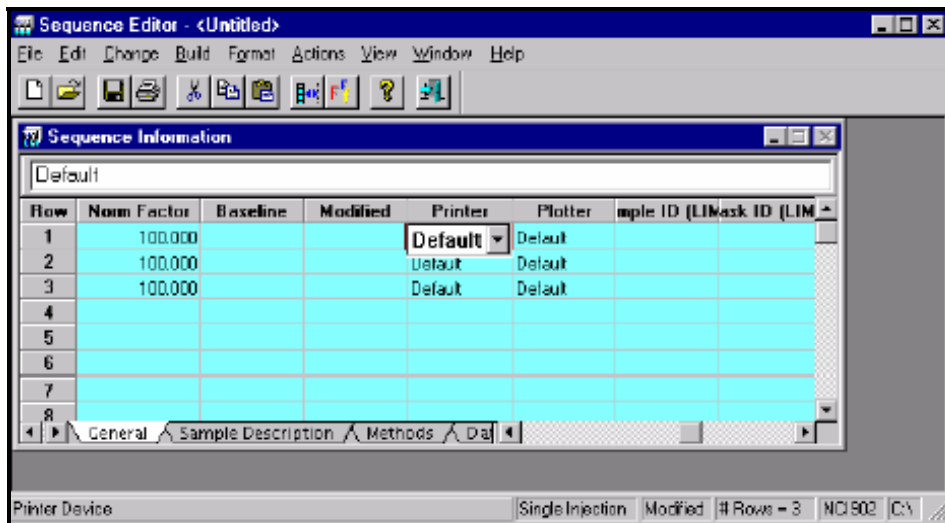
➤ **Para cambiar la información de la impresora en la secuencia.**

1. Recorra la ventana de la hoja de calculo horizontalmente hasta que las columnas de la impresora y del plotter se puedan observar. Están se encuentran a la derecha de la hoja de calculo.
2. Seleccione la celda de la línea 1 de la columna dando un **“click”** en el interior de esta

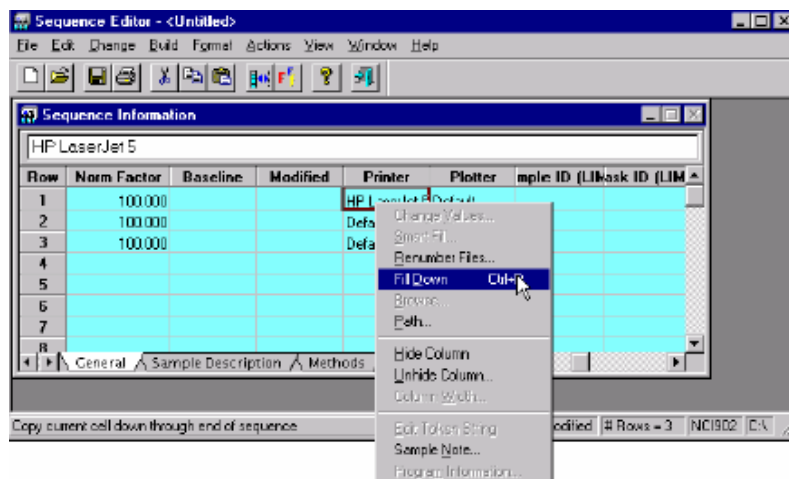


## Tutorial Parte 2

La impresora de **default** es la impresora prefijada en Windows, tal como se muestra abajo



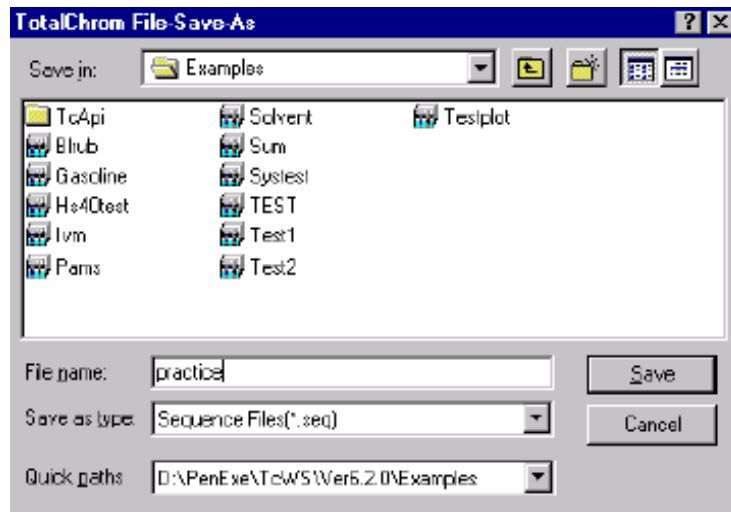
3. Dar un “click” en el cuadro de **Printers** y seleccione la impresora que ud. desee
4. Haga lo mismo para la columna del “**Plotter**”
5. Elija **“Fill down”** del menú de **“change”** para copiar el valor de la línea 1 a cada celda de la misma columna



### ➤ Para guardar esta secuencia como una secuencia nueva:

1. Elija **“Save as”** del menú **“File”**
2. Cuando se abra la ventana de dialogo escriba cualquier información que quiera almacenar con el archivo de la secuencia. **No seleccione audit trail**

3. Elija **OK**
4. En el cuadro de **"Totalchrom File Save As"**, nombre la secuencia como **practice**. Esto guarda la secuencia como C:\pénese\...\practice.seq



5. Elija **"Save"** para cerrar la ventana de dialogo y guardar el nuevo archivo de la secuencia

*Para mayor información de la secuencia , ver el capítulo 11 de la Guía del Usuario del Totalchrom*

**Ahora estamos listos para utilizar esta secuencia con la función de Reprocesamiento de Lotes**

### Reprocesamiento en Lote de Archivos de una Secuencia

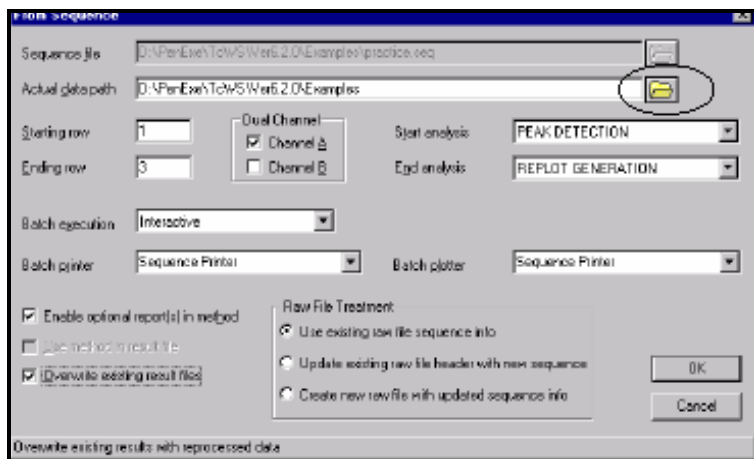
Una vez que ud. ha adquirido los datos y los ha almacenado en un archivo de datos crudos , puede reprocesar los datos repetidamente. La función de **Batch Reprocessing** permite reprocesar un numero grande de activos sucesivamente

Uno de los propósitos de reprocesar los datos es reanalizar los archivos de datos crudos enlistados en una secuencia. Para nuestro ultimo ejercicio, utilizaremos el archivo de secuencia que acabamos de crear para reprocesar los archivos de datos con nuestro método optimizado.

➤ **Para reprocesar los archivos de una secuencia:**

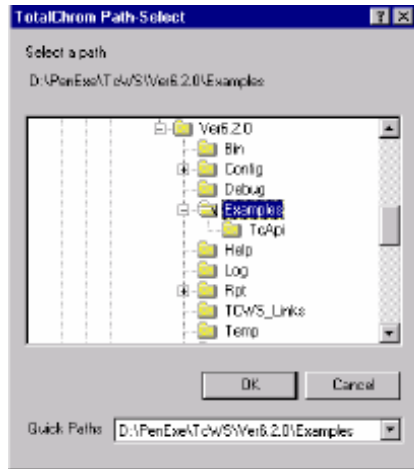
1. Seleccionar **Batch** del menú **Actions**

Debido a que seleccionamos la función de **Batch Reprocessing** cuando hemos abierto una secuencia , aquella secuencia es proporcionada como default

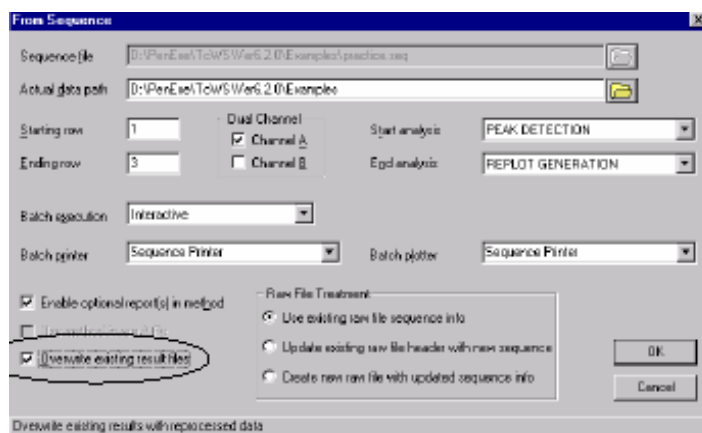


2. Dar un **click** en el fólder amarillo de la línea de “**Actual data path**” para buscar el directorio de Ejemplos.

La ruta de datos es el directorio en donde los archivos crudos y de resultados están almacenados. Si usted utiliza la ruta completa para sus archivos de datos en la hoja de calculo de la secuencia, la cual se elaboro en el ejercicio anterior, ud. puede dejar este campo en blanco.

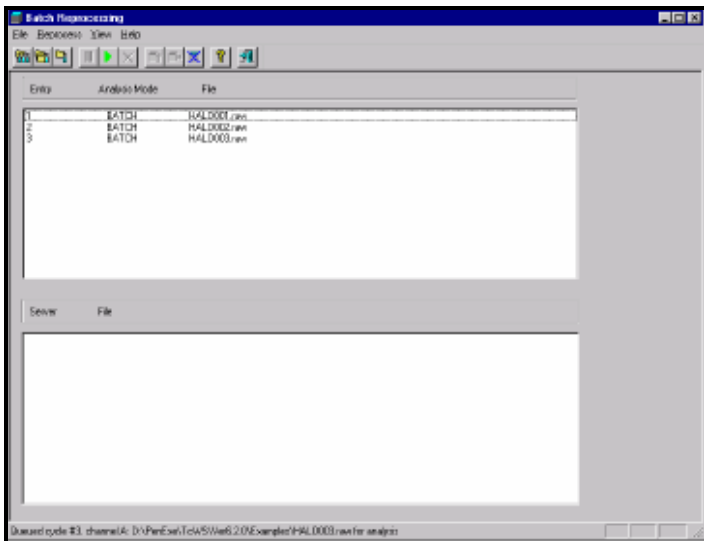


3. Dar un “click” en ok
4. Seleccionar **PEAK DETECTION** en el cuadro de “**Star Análisis**” y **REPLOTT GENERATION** en el cuadro de “**End Análisis**”
5. Seleccionar **Local** (si ud. tiene Client/Server) ó **Interactive** (si ud. tiene Workstation) para la impresión de las corridas
6. Seleccionar **“Overwrite existing result files”**
7. Seleccionar **Ok** para aceptar el resto de los valores de **default**



## Tutorial Parte 2

La ventana de Reprocesamiento se abre enlistando los archivos crudos que están programados para reprocesar. Estos son los tres archivos de nuestra secuencia.



8. Selección **"Star"** del menú de **"Reprocess"** para empezar con el procesamiento de los datos. Ud. puede iniciar el proceso del lote dando un **"click"** en la flecha verde de la barra de herramientas.

Las corridas de la lista son borradas mientras están son reprocesadas. El reporte y replot para cada archivo serán impresos una vez que el análisis del dato este completo.

9. Para cerrar la ventana de **"Batch Reprocessing"** y regresar al **Navegador** , seleccione **"Exit"** del menú **"File"**.

*Para mayor información sobre reprocesamiento de lotes, ver el capítulo 15 de la Guía de Usuario del Totalchrom.*

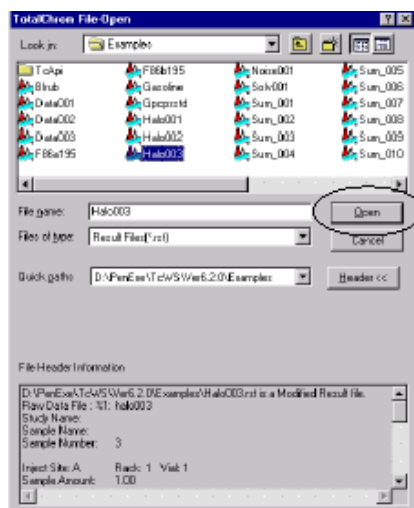
## Revisar los resultados del reproceso

Una vez que se termine el reprocesamiento , ud. puede ver los resultados utilizando Reprocess Results

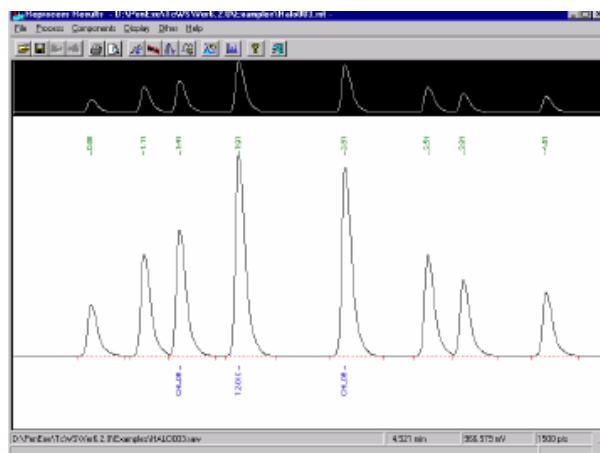
- **Para ver los resultados de los archivos en Reprocess Results:**  
Dar un **"click"** en el icono de **"Results"** de la pantalla del Navegador.



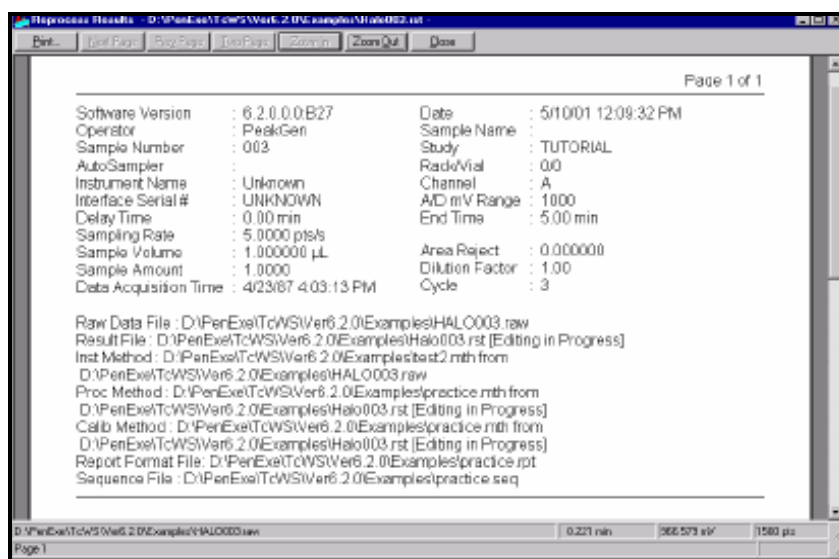
2. Seleccionar el archivo **Halo003.rst** del directorio de ejemplos.



3. Dar un “click” en **Open**



## Tutorial Parte 2



Su reporte impreso deberá semejarse al reporte de arriba

***Felicidades***

***Ud. ha terminado exitosamente el Tutorial completo del Totalchrom***